

Technická univerzita v Liberci

FAKULTA PŘÍRODOVĚDNĚ-HUMANITNÍ A PEDAGOGICKÁ

Katedra chemie

Studijní program: učitelství pro 2. stupeň základní školy

Studijní obor (kombinace): chemie - zeměpis

PROSTOROVÁ PŘEDSTAVIVOST V CHEMII

SPATIAL IMAGERY IN CHEMISTRY

Diplomová práce: 06 – FP – KCH - 009

Autor:

Lucie Koudelková

Podpis:

.....

Adresa:

Žitavská 1497

407 47, Varnsdorf

Vedoucí práce: Ing. Jan Grégr

Konzultant: PhDr. Bořivoj Jodas, Ph.D

Počet

stran	grafů	obrázků	tabulek	pramenů	příloh
69	0	87	6	19	2

V Liberci dne: 30.11.2009

Prohlášení

Byla jsem seznámena s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědoma povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše. Diplomová práce je majetkem školy, s diplomovou prací nelze bez svolení školy disponovat.

Diplomovou práci jsem vypracovala samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

V Liberci dne 30. 11. 2009

Lucie Koudelková

Poděkování

Z tohoto místa děkuji všem, kteří mě během psaní této práce podporovali, především své rodině a příteli. Největší díky ale patří vedoucímu diplomové práce Ing. Janu Grégrovi za jeho nesmírnou podporu, podnětné nápady a obětavost.

Anotace:

Diplomová práce „Prostorová představivost v chemii“ je zaměřena pro rozvoj představivosti v chemii u žáků základních a doplňkově středních škol. Využívá molekulární vizualizaci pro vysvětlení prostorových pojmů v chemii pomocí některých softwarů, týkajících se např. pravidelného uspořádání vazeb okolo centrálního atomu, geometrických tvarů vyplývajících ze struktury molekul a vysvětlování pojmů isomerie. Další část práce se zaměřuje na testování prostorové představivosti, především náměty pro tvorbu samotných testů a jejich možnosti testování na základních školách.

Klíčová slova: prostorová představivost, výuka chemie, molekulární vizualizace, isomerie, testování.

Abstract:

The diploma thesis is called “Spatial imagery in chemistry”. It deals with the development of imagination in chemistry of primary and secondary school pupils. It uses molecular visualization to explain spatial concepts in chemistry using certain software programs. These programs refer to a regular arrangement of bounds around the central atom, explanation of concepts of isomerism or geometric shapes based on a molecular structure. Furthermore, the thesis is focused on testing the spatial imagination. Above all, it deals with suggestions of tests and the ways and methods used for testing at primary schools.

Keywords: Spatial imagery, chemistry teaching, molecular visualization, isomerism, testing.

Annotation:

Die Diplomarbeit „die Raumvorstellungsfähigkeit in der Chemie“ ist ausgerichtet auf die Entwicklung der Vorstellungsfähigkeit in der Chemie bei den Schülern an den Grund- und zusätzlich auch Mittelschulen. Sie nutzt aus die Molekularsichtbarmachung für die Erklärung der räumlichen Begriffe in der Chemie mithilfe einiger Softwares, die z. B. die regelmäßige Strukturierung der Bindungen um das zentrale Atom, aus der Struktur der Moleküle stammende geometrische Formen oder die Erklärung der Begriffe der Isometrie betreffen. Weiter wird die Arbeit aufgerichtet auf das Testen der Raumvorstellungsfähigkeit, vor allem auf die Vorschläge für die Gestaltung einzelner Tests und mit ihrer Hilfe auf die Möglichkeiten des Testens an den Grundschulen.

Grundbegriffe: Raumvorstellungsfähigkeit, Chemieunterricht, Molekularsichtbarmachung, Isomerie, Testen.

OBSAH:

1. PROSTOROVÁ PŘEDSTAVIVOST	7
1.1 Úvod do problematiky	7
1.2 Historie.....	8
1.3 Představivost obecně.....	10
2. PROBLÉMY CHEMIE VYŽADUJÍCÍ PROSTOROVOU PŘEDSTAVIVOST..	13
2.1 Úvod.....	13
2.2 Izomerie pro organické sloučeniny	14
2.2.1 Konstituční izomerie	16
2.2.2 Konfigurační izomerie	20
2.3 Izomerie pro anorganické sloučeniny	23
2.4 Konformace.....	23
3. MOŽNOSTI VIZUALIZACE	27
3.1 Úvod.....	27
3.2 Možnosti vizualizace	27
4. MNOHOSTĚNY A TEORIE VSEPR	32
4.1 Mnohostěny (polyedry).....	32
4.2 Teorie VSEPR.....	35
5. NÁMĚTY K ROZVOJI PROSTOROVÉ PŘEDSTAVIVOSTI.....	37
5.1 Úvod.....	37
5.2 Krystalové mřížky.....	38
5.3 Využití vizualizačních programů pro jednoduché sloučeniny.....	44
A. Možná záměna methanu s prop-1,2-dienem	47
B. Molekula butanu.....	48
C. AB ₄ - methan jako zástupce pravidelného tetraedru a jeho deriváty	49
D. AB ₅ - chlorid fosforečný PCl ₅	52
fluorid chloritý ClF ₃	54
E. AB ₆ - fluorid sírový SF ₆	55
fluorid bromičný BrF ₅	57
6. ZÁVĚR	62
7. SEZNAM LITERATURY	64
8. PŘÍLOHY	65

1. PROSTOROVÁ PŘEDSTAVIVOST

1.1 Úvod do problematiky

Dnešní prostorová představivost mládeže je značně limitovaná především díky jejich způsobu života. Již od útlého dětství tráví veškerý svůj čas většina dětí u počítačů. Ty tam jsou doby stavebnic, hraní si s kostičkami, modelováním aut či letadel nebo vyřezáváním si různých předmětů. I tyto zcela jednoduché aktivity nenásilnou formou rozvíjí u dětí prostorovou představivost. Podobně i u sportovních aktivit dětí je prostorová představivost nepostradatelná. A to například při potřebě rychlého rozhodování nebo k rozvoji periferního vidění.

Prostorová představivost je nezbytnou součástí každého z nás. Proto je nutné ji u dětí rozvíjet již od raného věku. Jestliže nejsou vhodné podmínky pro rozvoj představivosti v rodině dítěte, je důležité se na tuto činnost zaměřit na základních a později i na středních školách. Žáci prostorovou představivost nejvíce využívají v matematice, ale stejně tak je nezbytná i v ostatních vyučovacích předmětech. V této práci se zaměřím na rozvíjení prostorové představivosti žáků základních a také středních škol. A to především pomocí některých programů, které jsou velice jednoduché na ovládání a též jsou volně dostupné na internetu jako freeware. Tyto vizualizační programy nabízí širokou škálu možností jejich využití. Pro tuto práci postačí trojrozměrné zobrazení struktur, se kterými lze různě otáčet, měnit barvy jednotlivých atomů, strukturu zobrazovat v několika modelech pro zobrazování, a také některé složitější úkony jako měření délky vazeb či vazebných úhlů. Pro práci je ale nutná přítomnost a kontrola vyučujícího.

Práce se nejprve teoreticky zabývá prostorovou představivostí obecně a konkrétními problémy chemie, které prostorovou představivost vyžadují. Jedná se o prostorové uspořádání vazeb a izomerii, a to jak pro sloučeniny organické, tak i sloučeniny anorganické. Dále je DP zaměřena na možnosti 3D zobrazování struktur v některých vizualizačních programech. Největší část mé práce se věnuje námětům pro rozvoj představivosti přímo v hodinách chemie s využitím konkrétních příkladů a vizualizačních programů. Také se pokouším o návrh testování úrovně prostorové představivosti u žáků. A chci vyvolat zvýšení zájmu o tuto problematiku, aby se chemie stala z předmětu obávaného, předmětem zajímavým a přínosným pro budoucnost žáků.

1.2 Historie

Prostorovou představivost využívali lidé již odpradáвна. Nejprve se jednalo o představivost spojenou především s matematikou a geometrií. První vyspělé civilizace vznikaly již před 5 tisíci lety a koncentrovaly se kolem velkých řek v úrodných oblastech. Jednalo se hlavně o Egypt, Mezopotámii a Čínu. V Egyptě byla matematika již ve 2. tisíciletí př. n. l. samostatnou disciplínou, která se zabývala operacemi s přirozenými čísly, se zlomky či výpočty obsahů a objemů neznámých těles. V té době již uměli pomocí provázků sestavit pravoúhlý trojúhelník a věděli, že pro něj platí určité zákonitosti, které byly později nazvány jako Pythagorova věta. Ovládali i trojčlenku a řešení lineárních rovnic o jedné neznámé. V době kolem roku 600 př. n. l. vzniká na území egyptské říše nauka o vyměřování země. K rozvoji matematiky přispěl samozřejmě také rozmach celé egyptské říše a stavba monumentálních staveb. Záplavy Nilu vedly každým rokem ke změnám území, a pozemky se proto musely znovu a znovu vyměřovat. Pomocí provazu a tyčí dokázali Egyptané vyměřovat hranice jednotlivých pozemků. Byli schopni také projektovat zavlažovací kanály na tak rozsáhlém území, dále měnit členitost terénu, počítat množství obilí potřebného k setbě apod. Největší obdiv si ale jistě zaslouží stavba starých chrámů a pyramid. Předpokládá se, že před každou vlastní stavbou byly vytvořeny projekty na papyrových svitcích a v některých případech i trojrozměrné modely. Jako příklad lze uvést chrám Amenemheta III. v Dahšúru, kde byl nalezen vápencový model blíže neurčené pyramidy. Své výpočty používali Egyptané především k řešení praktických úkolů. Podobně na tom byli také Sumeři, Babylóňané, Akkádcí či Asyřané.

Další významnou kolébkou rozvoje byla oblast Mezopotámie, která byla osídlena již v 10. tisíciletí př. n. l. Největšího rozmachu však říše zažila v období 4. tisíciletí př. n. l., kdy vzniká jedno z nejstarších písem na světě vůbec. Jednalo se o obrázkové písmo, které se znázorňovalo tzv. piktogramy. Ty označovaly celé věci, části věcí nebo pouze část určitého předmětu. Dochovalo se velké množství matematických tabulek, které jsou potvrzením, že tato civilizace již v té době byla v oblasti matematických výpočtů velmi vyspělá. Co se týče praktických úloh, nepoužívaly se v Mezopotámii geometrické názvy těles, ale pravá jména dané věci (např. člun, koryto, studna apod.). Matematické výpočty byly zaměřeny pouze na věci, které se vyskytovaly v běžném životě. Podobně jako v Egyptě se pro výpočty

používala desítková soustava. V Mezopotámii se vytvořila kombinovaná soustava se základem 10 a 60. Později se z této soustavy přešlo pouze na soustavu se základem 60. Problémem byla absence nuly, která se začala zapisovat až s rozvojem astronomických tabulek. Větší uplatnění při matematických výpočtech neměla, její použití bylo nedůsledné.

Mezi další významné civilizace můžeme dále zařadit Sumerskou říši, Akkadskou či Asyrskou říši. Typickými pro tyto kultury byly spíše výpočty astronomické. Dokázali například vypočítat zatmění Měsíce, Slunce, či dokonce dokázali spočítat dráhy jednotlivých hvězd a pohyby některých planet.

Jak je patrné ze stručného přehledu vybraných dějin, již starověké civilizace uměly velice dobře pracovat s prostorovou představivostí a také ji prakticky využívat. Jak jinak si lze dnes vysvětlit vznik některých monumentálních staveb bez potřebných vědomostí a techniky? Prostorová představivost se rozvíjela ruku v ruce s matematikou a geometrií. Uvedené dávné civilizace byly schopny počítat takové matematické problémy, které byly objasněny až mnohem později. Kromě Egyptanů se problematikou geometrických úloh zabývali někteří řečtí filosofové a významní matematici, mezi které patří hlavně Euklidés, Archimédés a Apollónios. Euklidés se zabýval úvahami o objemu těles a pracoval s nimi tak, jako by znal základy infinitezimálního počtu (dnes diferenciální počet a integrální počet), který v 17. století objevili a definovali až Leibnitz a Newton. Do Evropy se díla řeckých matematiků dostávala prostřednictvím spisů, které byly mnohdy obohaceny překlady arabských textů. V 17. století, od doby vědecké revoluce, se geometrie využívala k algebraickému popisu drah hmotných bodů. Descartes a Fermat se zasloužili o vznik analytické geometrie, která se velmi snadno a rychle uplatnila v mnoha praktických oborech. Analytická geometrie byla také předpokladem vzniku diferenciálního a integrálního počtu. Období renesance přineslo dle Rossiové (1988) uplatnění zobrazovacích metod jak ve stavebnictví, tak i v malířství. V této době se objevují počátky projektivní geometrie. G. Monge rozvinul jako zvláštní odvětví geometrie deskriptivní geometrii, která se od 19. století stala nezbytnou součástí stavitelství a strojírenství.

1.3 Představivost obecně

Představy jsou nezbytnou součástí života každého jedince. Rozvíjejí se již od útlého věku a mají velice blízko k fantazii, proto lze fantazii definovat jako schopnost vytvářet si určité představy. Dle Čápa (1993) se jedná o psychický proces, který vede k vytváření našich představ. Základem je vždy naše zkušenost, vjemy a jejich reprodukce. Dle Nakonečného (1998) může fantazie být rekonstrukční a tvůrčí či bezděčná a záměrná. Dále se může jednat o fantazii představ před spaním, která se odborně nazývá hypnagogická pseudohalucinace. Jde o dobu přechodu mezi bděním a spánkem a člověk je ještě schopen vnímat určitou realitu. Samotná představa vzniká u jedince na základě vjemů, které si lze představit jako obraz jednoho celku. Představy, narozdíl od vjemů, mají svůj původ v činnosti mozkové kůry. D. Hume (1998) definoval představu jako „kopii dojmů“. Fantazie a představy plní dle Čápa (1993) důležité životní funkce. Jednak pro řešení určitých problémů, pro tvůrčí činnost a v neposlední řadě nám umožňuje obohatit lidský život něčím novým. Představivost velice úzce souvisí se vjemy. Vjem je dle Zemana (2003) definován jako živý a bezprostřední. Naproti tomu představa je vybledlá a zprostředkovaná. Funkce představ se nám promítá z minulosti, ale zároveň se vztahuje k budoucnosti našimi představami a sněním. Tímto způsobem je jedinec schopen vyrovnat svou osobní situaci. Typickou vlastností představ je jejich názornost, neboli obraznost spojená s myšlením, která může vést ke zjednodušování a k lepšímu pochopení abstraktních věcí. Představy mohou být různého druhu dle různých hledisek třídění. Mezi nejznámější dělení patří klasifikace dle reprodukce na představivost sluchovou, zrakovou, hmatovou a chuťovou.

Základním klasifikačním kritériem představ je jejich způsob vzniku:

1. dle převládajícího receptoru na představivost **zrakovou, sluchovou, motorickou, čichovou, chuťovou, hmatovou;**
2. vychází z konkrétnosti či abstraktnosti -
 - **jedinečné** – představa konkrétní věci, předmětu (př. byt, pes ...)
 - **obecné** – obecná představa určité věci, předmětu (př. obecná představa učitele, bytu, psa...);
3. mechanismus uplatňující se při jejich vzniku -
 - **fantazijní** – mají s realitou velice málo společného (vlastní svět)

- **pamětní** – jedinec si něco zapamatoval a tu samou věc si později vybavil.

Pojem samotné představivosti se v literatuře objevuje jen ve velmi malé míře, někde téměř vůbec ne, a tak je celkem složité tento pojem přesně specifikovat. Představivost si můžeme vysvětlit jako určitou schopnost, kterou potřebujeme ke každodennímu životu. Ta se u jedince rozvíjí s přibývajícím věkem. U dětí jsou představy mnohem hlubší než u dospělých jedinců a jsou také mnohem intenzivnější, ne však tolik bohaté jako u dospělých. U dospělých jedinců dochází k záměrné představivosti, často spojené s určitým cílem. S pojmem prostorové představivosti se nejčastěji setkáváme v matematice a zájem o tuto problematiku se v průběhu vývoje kulturní společnosti zvyšoval. Vyšší vlna zájmu přišla na počátku 20. století. V období 20. a 30. let 20. století však nastalo období útlumu. Nový zájem vyvstal až po roce 1960, především s rozvojem kognitivní psychologie. Jako jeden z podnětů pro hlubší studium prostorové představivosti se jeví jiný pohled na výzkum lidského myšlení a na pokroky výzkumu v oblasti spánku (jedná se hlavně o fáze spánku, které jsou spojeny s představami a sny). Dalším možným stimulem je hlubší zájem o problematiku senzorické deprivace a snaha o pochopení a nalezení možných řešení. Rok 1960 lze tedy považovat za jakýsi mezník, tehdy byl totiž rozšířen pohled na člověka; s tím souvisejí znovuobjevené představy a samotná představivost. Následující období tak můžeme považovat za období rychle rostoucího zájmu a tuto problematiku. Poslední pojem, který bychom neměli opomenout, je bezesporu tvořivost, nebo častěji uváděné označení kreativita. Kreativita je překladem latinského slova *creo* = tvořím. Dle Čápa (1993) je kreativita soubor vlastností, které jsou předpokladem pro řešení některých problémů a také pro tvůrčí činnost. Nelze ji však zaměňovat za inteligenci, i když ta má k samotné kreativitě velice blízko. Tento názor je pro dnešní psychologii preferovanější. Kreativitu definuje Smékal (2004) jako netradiční přístup, originalitu, iniciativu či vynalézavost při řešení určitého problému. Po dlouhou dobu se uvažovalo, že kreativita je vrozenou schopností některých jedinců. Jak ale bylo později prokázáno, kreativita závisí také na získaných zkušenostech, dovednostech a v neposlední řadě i na inspiraci či na okamžitém nápadu. Kreativitu lze testovat testy vytvořenými speciálně pro tuto schopnost. Jedná se o úlohy, které závisí na počtu řešení, jejich originalitě a také na kvalitě. Dle Čápa

(1993) je prokázáno, že se kreativita žáků na školách spíše brzdí. Pro učitele jsou takoví žáci příliš horliví, často neposlušní a navrhuji řešení, která jsou neobvyklá.

Kdybychom měli shrnout výše uvedené pojmy, dostaneme se k závěru, že všechny tyto pojmy jsou pro rozvoj prostorové představivosti nezbytné. Proto se teď zaměřím na samotný pojem prostorové představivosti, který budu ve stručnosti definovat.

Na otázku, co je to prostorová představivost, můžeme odpovědět několika definicemi:

Podle Perenčaje a Repáše v Molnár (2004): „Jedná se o jakési vidění prostoru. Tento prostor však musí vidět každý, kdo vidí. Problém je ale v tom, že nestačí prostor vidět, ale je nutné si ho i uvědomit.“

Dle Zykové a Lomonova v Molnár (2004): „Prostorová představivost je chápána jako schopnost operovat s prostorovými představami, nejsou to představy o činnosti, ale rozumová činnost s představami. Úspěšnost představivosti je pak závislá na zobecnělosti, strukturovanosti a diferencovanosti představ.“

Dle Šarounové v Molnár (2004) je prostorová představivost souborem dílčích schopností, které se týkají představ prostoru, tvaru, vzájemných vztahů mezi předměty a tělesy.

Perný (2004) definuje prostorovou představivost jako intelektovou schopnost a dovednost vybavovat si dříve viděné, dříve nebo v daném momentě viděné nebo objekt v prostoru na základě jeho rovinného útvaru.

Molnár (2004) definuje prostorovou představivost jako soubor schopností, které se týkají našich představ o tvarech a o vzájemných vztazích mezi geometrickými útvary v prostoru (prostorovou představivost chápe v užším slova smyslu jako geometrickou prostorovou představivost).

Perný (2004) se též zabývá představivostí geometrickou, prostorovou a matematickou. Představivost geometrická je dle Kuřiny (1990) velice důležitou dovedností pro tvořivost a pro konání mnoha povolání. Měla by být rozvíjena již od prvního ročníku základních škol. Dále tvrdí, že geometrická představivost, která je definována jako dovednost vybavovat si geometrické útvary a jejich vlastnosti, v sobě zahrnuje i představivost prostorovou.

Definice, co prostorová představivost je, existuje hned několik. Důležité je určitě zmínit, že prostorovou představivost můžeme charakterizovat též jako schopnost vytvářet si představy těles, manipulovat s tělesy, měnit jejich parametry,

kombinovat je a vytvářet představy nové. Dle Štípka (2004) bychom neměli prostorovou představivost chápat pouze jako vybavení si nějakého obrazu, ale právě jako schopnost práce s představou. Dále tvrdí, že pro optimální rozvoj prostorové představivosti je důležité zachytit tzv. senzitivní období, to je období, které je zvláště vhodné k formulaci určitých oblastí osobnosti. Dle Piageta (1997) je vývoj symbolického a předpojmového myšlení datován od 1,5 – 2 let věku dítěte. Tato etapa trvá zhruba do 4 let věku jedince a navazuje na ni období utváření názorného myšlení, charakteristické především činností prováděnou v představě. Ve věku od 7 do 12 let dochází k operačním podnětům. V tomto období chápe dítě identitu a je schopno spojit různé aspekty zadaného úkolu a vyvodit výsledky a důsledky. Jde o období konkrétních operací. V období adolescence se dle Piageta utváří formální myšlení, které spočívá především v operování s konkrétními předměty. Žák je schopen logicky, hypoteticky a deduktivně vyvozovat závěry. Přejít mezi jednotlivými obdobími vysvětlil Piaget zrání nervových struktur a velký význam přisuzoval také vnějším vlivům.

2. PROBLÉMY CHEMIE VYŽADUJÍCÍ PROSTOROVOU PŘEDSTAVIVOST

2.1 Úvod

Studenti chemie i ostatní, kteří pracují v oboru chemie, by měli chápat určité souvislosti. Měli by pochopit některé problémy, které vyžadují prostorovou představivost a práci s ní. Patří sem především geometrická izomerie, optické izomery a konformace. Dále mohou pracovat s deformací těles či jejich vzájemnými překryvy, které jsou způsobeny různým pohledem pozorujícího. Je důležité, abychom si uvědomili kolikavazný prvek je, protože při neznalosti základních chemických poznatků těžko rozeznáme, co za sloučeninu vidíme, a těžko poté správně určíme její vzorec. Lze si pomoci programy zaměřenými na tuto problematiku. Alespoň jeden z nich by měl každý chemik ovládat. Pro nás studenty je to výborná „hračka“, a také si tím prohlubujeme získané znalosti a pohledy na určité sloučeniny.

Které problémy chemie vyžadují prostorovou představivost:

- uspořádání atomů a vazeb okolo centrálního atomu, vznik pravidelných geometrických tvarů – mnohostěnů;
- stavba řetězcových molekul – spojování pravidelných geometrických tvarů;
- deformace pravidelných geometrických tvarů při různosti atomů okolo centrálního atomu;
- konformace u organických sloučenin;
- isomerie organických i anorganických sloučenin.

K řešení všech těchto problémů nepostačí jen klasické stavebnice molekul. Jejich použití je vhodné na základních školách pro prvotní seznámení žáků s prostorovým vnímáním molekul na základě modelů, které si mohou žáci sami vytvořit. Vyšší stupeň kreativity představuje použití plastické modelovací hmoty a špejlí. Žáci si mohou vymodelovat i nevazebné elektronové páry a navolit libovolné úhly i vzdálenosti mezi vazbami. Oba typy modelů vyžadují kontrolu vyučujícího, aby ohlídal dodržení základních charakteristik vytvářených modelů. Tvorba modelů, které by znázorňovaly současně polyedrické geometrické tvary, je náročnější. Stavebnice je většinou neumožňují – vlastní kreativní tvorba s modelovací hmotou může být doplněna tužšími průhlednými foliemi, z nichž se vytvoří plochy mnohostěnů a upevní se v potřebné poloze modelovací hmotou. Mnohem výhodnější a atraktivnější pro žáky i studenty je využití chemických 3D vizualizačních programů (viz kap. 3). Mládež se zajímá o práci s počítači a vhodné využití uvedených programů při výuce a hlavně samostatná práce s těmito programy pak napomáhají rozvoji prostorové představivosti. Může však i zvýšit zájem o chemii jako školní předmět.

2.2 Izomerie pro organické sloučeniny

V této kapitole se zaměřím především na izomerii. Izomerie má v chemii obecný význam, její důležitost se projevuje hlavně v chemii organické. Proč právě organická chemie? Především proto, že atomy uhlíku se neobyčejně snadno navzájem vážou a řetězí se. Řetězce organických sloučenin se skládají z jednoho, dvou až ze 100 000 i více atomů. Další příčinou jsou valenční elektrony, které snadno vytvářejí vazbu s jinými atomy, hlavně s atomy vodíku, kyslíku, dusíku, síry, fosforu a atomy

halogenidů. Atomy uhlíku mohou být v řetězci zaměněny za atomy jiných prvků, jedná se především o kyslík, dusík a síru. V neposlední řadě také druh a počet atomů, struktura a uspořádání v molekule má za následek rozdílné fyzikální a chemické vlastnosti sloučeniny. Proto není jednoduchou záležitostí charakterizovat organickou sloučeninu. Vedle vzorce empirického musíme znát i vzorec strukturní. Kromě toho se s izomerií setkáváme také u sloučenin anorganických, a to především u sloučenin komplexních (koordinačních). Velmi častá je izomerie u stabilních komplexních částic, u kterých nedochází díky velké pevnosti vazeb volně k přenosu ligandů v koordinačních sférách. Jako středový atom se zde v největší míře uplatňuje přechodný kov.

Izomerie je jev, kdy mají různé sloučeniny stejný sumární vzorec, ale liší se prostorovým uspořádáním atomů. Tyto sloučeniny označujeme jako izomery. Izomery mají díky jinému prostorovému uspořádání atomů v molekule rozdílné fyzikální a chemické vlastnosti, mají však stejnou molární hmotnost a kvantitativní složení. S rostoucím počtem atomů v molekule rychle stoupá i počet izomerů (viz tab. 2.2). Samotné izomery rozdělujeme do dvou základních skupin; jedná se o izomery konstituční (strukturní) a izomery konfigurační (prostorové), které se dále dělí dle schématu 2.2.

SUMÁRNÍ VZOREC	POČET IZOMERŮ
C_4H_{10}	2
C_5H_{12}	3
C_6H_{14}	5
C_7H_{16}	9
C_8H_{18}	18
C_9H_{20}	35
$C_{10}H_{22}$	75
$C_{20}H_{42}$	366 319
$C_{30}H_{62}$	4 111 846 763
$C_{40}H_{82}$	62 491 178 805 831

Tab. 2.2: počty izomerů s rostoucím počtem atomů v molekule

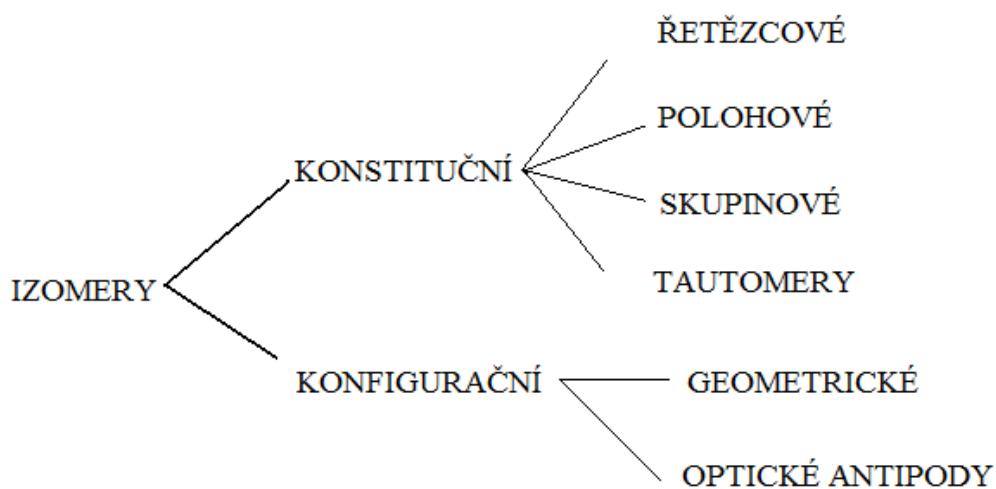
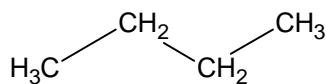
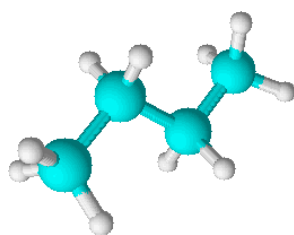


Schéma 2.2: rozdělení izomerů dle Vacíka (1999)

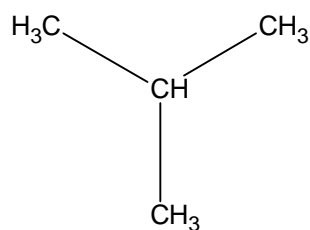
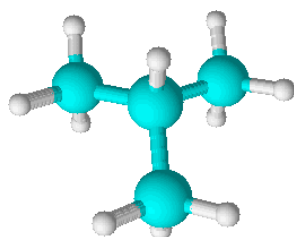
2.2.1 Konstituční izomerie

Konstituční izomerie je izomerie sloučenin se stejným sumárním vzorcem, ale různým uspořádáním atomů v molekule. Do této skupiny patří izomery řetězcové, polohové, skupinové a tautomery.

a) Řetězcové izomery – liší se uspořádáním uhlíkového řetězce. Základem je stejný sumární vzorec, ale různé větvení řetězce. Jako příklad uvádím butan a 2-methylpropan (viz obr. 2.2.1 a obr. 2.2.2).

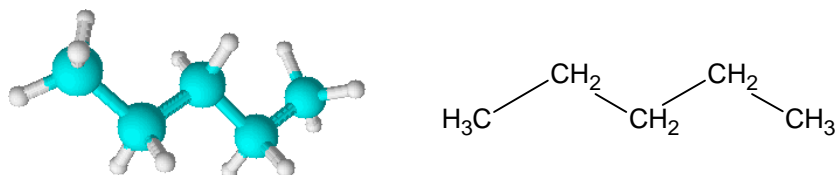


Obr. 2.2.1: butan

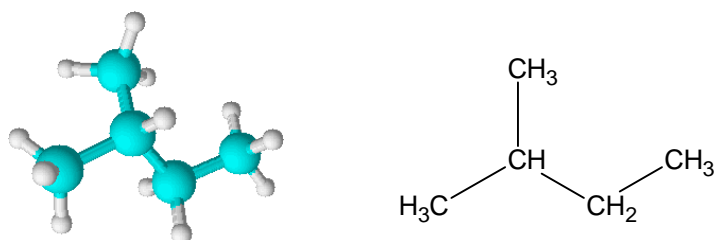


Obr. 2.2.2: 2-methylpropan

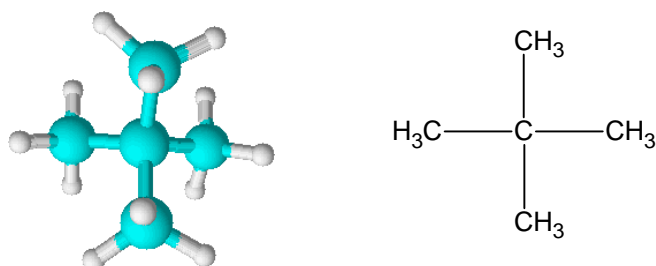
S narůstající délkou uhlíkového řetězce počet izomerů narůstá (viz tab. 2.2). Pro pentan jsou to izomery tři, u dekanu 75 a u n-ikosanu už 366 319 izomerů. Dalším příkladem je pentan se sumárním vzorcem C_5H_{12} , který lze zapsat také jako 2-methylbutan a 2,2-dimethylpropan (viz obr. 2.2.3, 2.2.4, 2.2.5).



Obr. 2.2.3: pentan



Obr. 2.2.4: 2-methylbutan



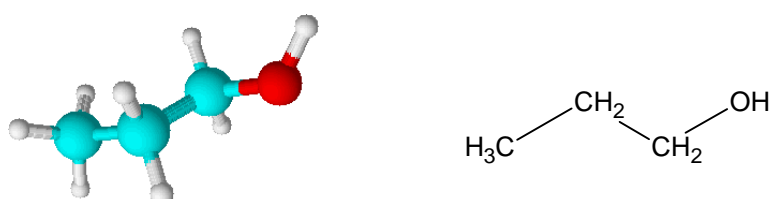
Obr. 2.2.5: 2,2-dimethylpropan

Na těchto příkladech lze ukázat rozdílné vnitřní uspořádání molekul. Tyto sloučeniny budou mít také rozdílné vlastnosti (viz tab. 2.2.1). Z tabulky lze vyčíst, že s rozvětvenějším řetězcem klesá teplota varu.

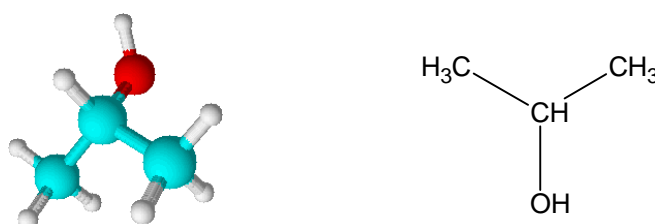
sloučenina	teplota tání °C	teplota varu °C
pentan	– 130	36,15
2-metylbutan	– 160	27,9
2,2-dimetylpropan	– 19,8	9,45

Tab. 2.2.1: teploty varu a tání sloučenin se sumárním vzorcem C_5H_{12}

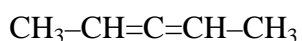
b) Polohové izomery – mají stejně jako izomery řetězcové stejný sumární vzorec, liší se ale polohou funkční skupiny na řetězci nebo násobnou vazbou na uhlíkovém řetězci. Jako příklad uvádím sloučeninu se sumárním vzorcem C_3H_8O , která se vyskytuje ve dvou izomerech, ale s rozdílnou polohou funkční $-OH$ (hydroxylové) skupiny (viz obr. 2.2.6). Rozdílná je také poloha násobné vazby u 2,3-pentadienu a 1,4-pentadienu (viz obr. 2.2.7). Na kuličkových modelech je kyslík znázorněn barvou červenou, vodík bílou a uhlík modrou. V následující tabulce (tab. 2.2.2) lze pozorovat rozdílné vlastnosti těchto sloučenin s umístěním hydroxylové skupiny.



Obr. 2.2.6: rozdílná poloha funkční $-OH$ skupiny 1-propanol



2-propanol



2,3-pentadien



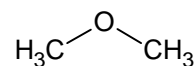
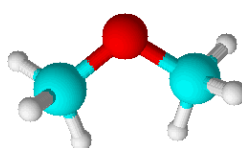
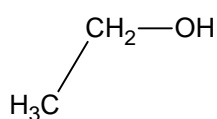
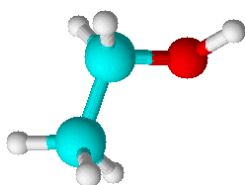
1,4-pentadien

Obr. 2.2.7: rozdílná poloha násobné vazby

sloučenina	bod tání °C	bod varu °C
1-propanol	– 127	97,15
2-propanol	– 89,5	82,4

Tab. 2.2.2: teploty varu a tání 1-propanolu a 2-propanolu lišících se umístěním $-OH$ skupiny

c) **Skupinové izomery** – stejný sumární vzorec, ale rozdílná funkční skupina. Příkladem je sloučenina se sumárním vzorcem C_2H_6O , která se vyskytuje ve dvou izomerech. Jedná se o ethanol s funkční $-OH$ (hydroxylovou) skupinou a dimethylether s funkční etherovou skupinou $-O-$. Ethanol je znázorněn na obr. 2.2.8, dimethylether je znázorněn na obr. 2.2.9, na kterém lze umístění funkční skupiny poznat podle kyslíku, který je označen červenou barvou. Tabulka 2.2.3 udává rozdílné vlastnosti těchto sloučenin s rozdílnou funkční skupinou.



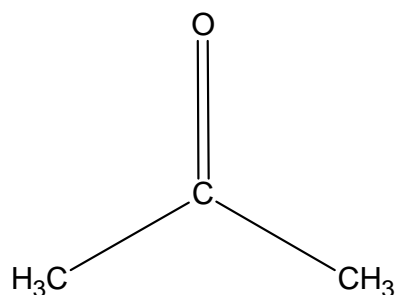
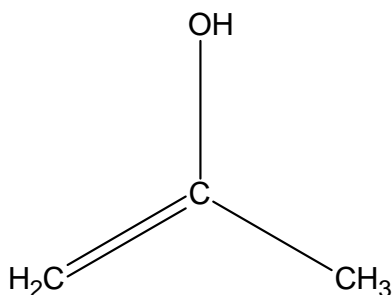
Obr. 2.2.8: ethanol

Obr. 2.2.9: dimethylether

sloučenina	bod tání °C	bod varu °C
ethanol	– 117	78,5
dimetylether	– 140	– 24,9

Tab. 2.2.3: teplota tání a varu sloučenin s polohovou izomerií

d) **Tautomery** – stejný sumární vzorec, ale liší se umístěním dvojné vazby a polohou jednoho z atomů vodíku. Rozlišujeme dva druhy tautomerů - enolformu (viz obr. 2.2.10) a ketoformu (obr. 2.2.11). Tyto dvě formy dohromady vytváří racemát, jedná se o směs antipodů v poměru 1:1.



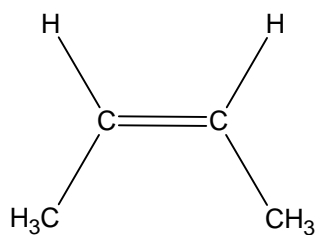
Obr. 2.2.10: 2-hydroxypropen (enolforma)

Obr. 2.2.11: propanon (ketoforma)

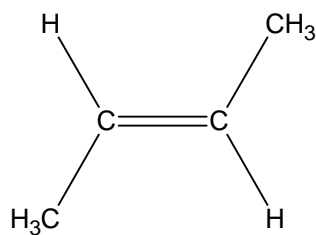
2.2.2 Konfigurační izomerie

Jedná se o izomery jediné sloučeniny, které jsou vyjádřeny jediným vzorcem, ale liší se prostorovým uspořádáním. Dle schématu 2.2 rozdělujeme konfigurační izomery na izomery geometrické a na optické.

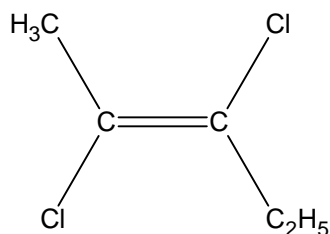
a) Geometrické izomery – tato izomerie je typická pro sloučeniny s násobnou vazbou, na kterých jsou různé substituenty. Tento typ izomerie je charakteristický omezením volné otáčivosti uhlíkových atomů, které jsou spojeny buď kruhem, nebo dvojnou vazbou. Substituenty, které jsou navázány na dvou sousedních atomech, jež jsou spojeny násobnou vazbou, se mohou vyskytovat v polohách cis- a trans-. Jestliže se substituenty vyskytují na jedné straně roviny, jedná se o izomery cis- (viz obr. 2.2.2.1). Pokud se nacházejí po obou stranách roviny, mluvíme o izomerech trans- (viz obr. 2.2.2.2). U složitějších molekul, kde jsou všechny čtyři substituenty, se zavádí označení E = entgegen (naproti sobě) – substituenty umístěny na různých stranách referenční roviny (viz obr. 2.2.2.3) a Z = zusammen (společně) – substituenty umístěny na stejné straně referenční roviny (viz obr. 2.2.2.4). Látky s geometrickou izomerií se liší především ve fyzikálních a některých chemických vlastnostech.



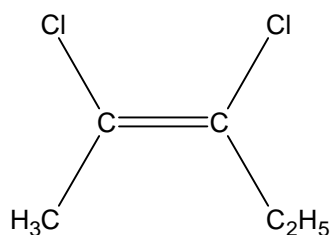
Obr. 2.2.2.1: cis-but-2-en



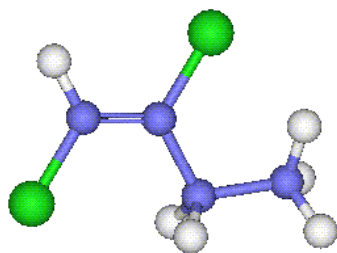
Obr. 2.2.2.2: trans-but-2-en



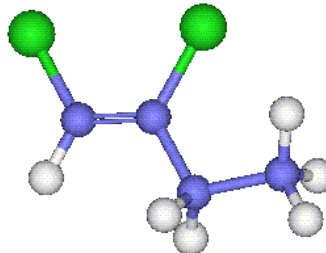
Obr. 2.2.2.3: E-2,3-dichlorpent-2-en



Obr. 2.2.2.4: Z-2,3-dichlorpent-2-en

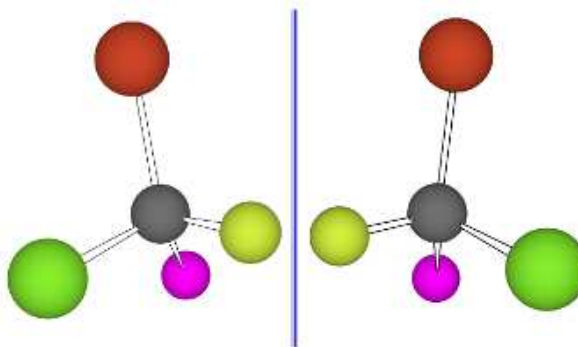


Obr. 2.2.2.5: E-2,3-dichlorpent-2-en
prostorové zobrazení



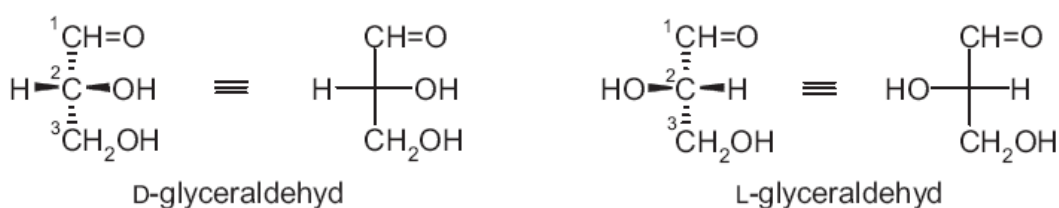
Obr. 2.2.2.6: Z-2,3-dichlorpent-2-en
prostorové zobrazení

b) Optické izomery – jedná se o sloučeniny se stejným sumárním vzorcem a s většinou shodných chemických a fyzikálních vlastností. Optické izomery jsou charakteristické svou fyzikální vlastností, která se projevuje stáčením roviny polarizovaného světla určitým směrem. Tyto sloučeniny nejsou totožné se svým zrcadlovým obrazem, proto se nazývají sloučeninami chirálními. Jedná se o sloučeniny opticky aktivní, které nezávisle na sobě popsali Holanďan J. H. VAN'T HOFF a Francouz A. LEBEL. Ti tvrdili, že vazby směřují od atomu uhlíku směrem od středu do pravidelného čtyřstěnu a substituenty se nacházejí v rozích tohoto čtyřstěnu (tetraedru). Oba optické izomery se k sobě mají jako zrcadlové obrazy, které nelze ztotožnit. Nejjednodušším příkladem jak si představit optické izomery je levá a pravá ruka. Pokud optický izomer stáčí rovinu polarizovaného světla doleva, jedná se o levotočivou sloučeninu. Pokud doprava, jedná se o sloučeninu pravotočivou. Směr otáčení značíme znaménky (+) a (-) vždy před názvem sloučeniny. Optické izomery se jinak označují jako enantiomery, stereoizomery či optické antipody. Dle Lišky (2007) se označení *optické antipody* doporučuje nepoužívat, je příliš zastaralé. Směs enantiomerů v poměru 1:1 je racemát, který je opticky inaktivní.



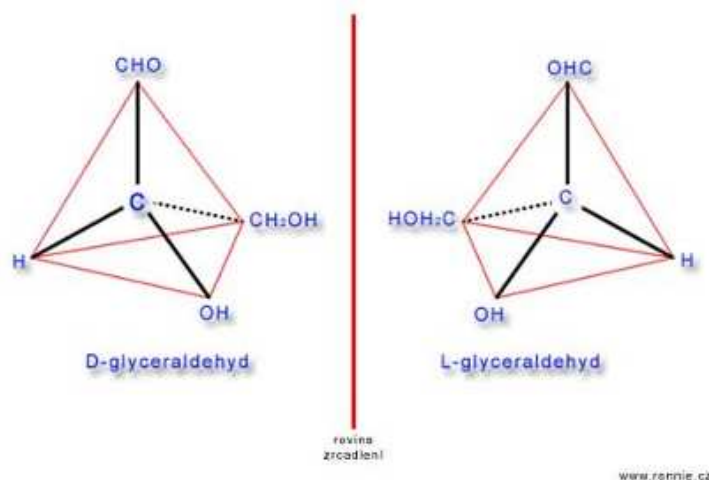
Obr. 2.2.2.7: optické izomery [1]

Německý chemik Emil Fischer zavedl převedení trojrozměrného vzorce do roviny. Fischerova projekce spočívá v zobrazení uhlíkového řetězce jako svislé čáry, na kterou se nahoru umístí nejnižše číslovaný atom uhlíku. Řetězec zakresluje se po svislici směrem dolů podle chiralidy na jednu či druhou stranu řetězce (viz obr. 2.2.2.8). Fischerova projekce se uplatňuje hlavně pro cukry a aminokyseliny. Vzorce v této projekci se nesmí otáčet či překlápět o 90°, lze s ním však otočit o 180° a nezměníme tím jeho smysl.



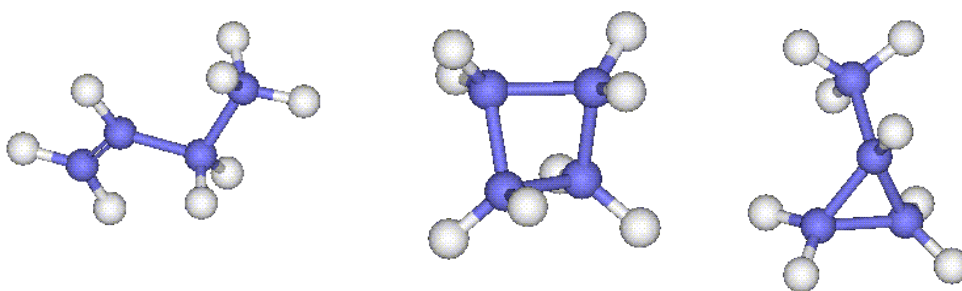
Obr. 2.2.2.8: D a L-glyceraldehyd – strukturní vzorec a Fischerova projekce [2]

Dle konfigurace dělíme látky na D- a L- řadu, která vychází z pravotočivého glyceraldehydu – aldotriosy (viz obr. 2.2.2.8 a 2.2.2.9). Rozhodující pro zařazení je konfigurace –OH skupiny na předposledním atomu uhlíku. Pokud má látka skupinu –OH na předposledním uhlíku napravo, náleží řadě D. Látky se skupinou –OH na předposledním uhlíku ve Fischerově projekci na levé straně náleží řadě L. Je důležité si uvědomit, že toto označení se nevztahuje ke směru otáčení, ale pouze k umístění na předposledním uhlíku ve Fischerově projekci. Vztah mezi směrem otáčení a příslušností do řady neexistuje. Příkladem opticky aktivních látek jsou sacharidy a některé karboxylové kyseliny.



Obr. 2.2.2.9: molekula D a L glyceraldehydu (tetraedr) [3]

Téma izomerie jsem si pro utváření prostorové představivosti vybrala cíleně, protože tento jev nabízí velké množství tvarů a struktur, se kterými studenti mohou pracovat. Pomocí počítačových programů pro zobrazování chemických obrazců mohou studenti zjišťovat různé tvary, které se schovávají pod jedním sumárním vzorcem. Výuka izomerie založená na aktivní práci studentů, je jednou z možností, aby studenti lépe pochopili toto učivo a neučili se pouze nějaké poučky nazpaměť. Jako příklad k výuce izomerie jsem uváděla především butan a pentan. Mezi dalšími zajímavými nápady lze uvést sumární vzorec C_4H_8 , který nabízí jak strukturu lineární, tak strukturu cyklickou, což jde vidět na obr. 2.2.2.10.



Obr. 2.2.2.10: sloučenina se sumárním vzorcem C_4H_8

2.3 Izomerie pro anorganické sloučeniny

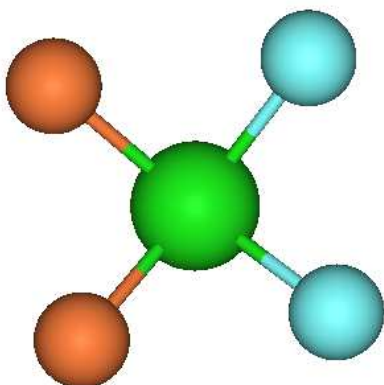
Jak jsem zmínila v kap. 2.2, s izomerií u anorganických sloučenin se setkáváme především u komplexních (koordinačních) sloučenin. Koordinační sloučenina je taková sloučenina, u které jsou k centrálnímu atomu navázány ligandy, jejichž počet převyšuje oxidační číslo centrálního atomu. Isomerii koordinačních sloučenin dělíme na izomerii vazebnou, ligandovou, ionizační a stejně jako u organických sloučenin na izomerii geometrickou a optickou. Nebudu se podrobněji zabývat všemi typy izomerie pro koordinační sloučeniny, ale zaměřím se pouze na izomerii geometrickou a optickou.

Geometrická izomerie – u tohoto typu izomerie se liší geometrické uspořádání jednotlivých ligandů v koordinační sféře. Nejčastěji se vyskytuje u čtvercových a oktaedrických komplexů. Abychom předešli možné záměně, používá se pro tyto izomery označení cis-, trans- (obr. 2.3.1) a fac- a mer- (obr. 2.3.2).

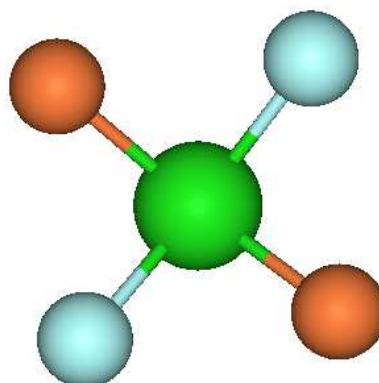
Fac = faciální - týkající se vnější plochy (obsazeny vrcholy jedné stěny oktaedru)

Mer = meridionální - tři stejné ligandy leží v rovině procházející středem tělesa

cis-

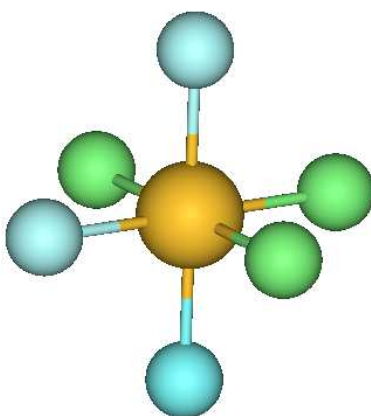


trans-

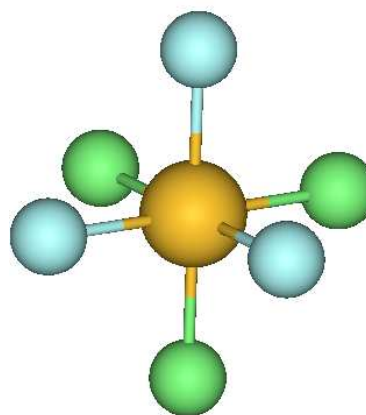


Obr. 2.3.1: znázornění cis- a trans- izomerů

mer-

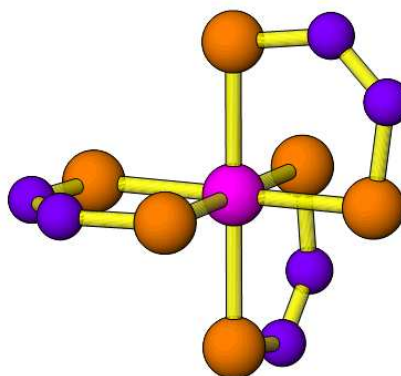
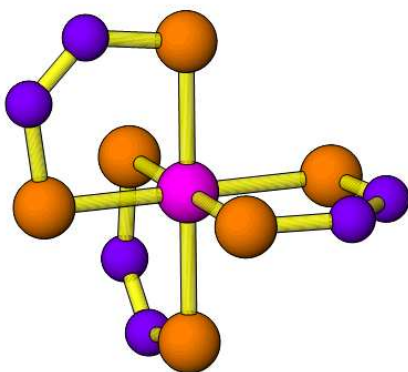


fac-



Obr. 2.3.1: znázornění mer- a fac- izomerů

Optická izomerie – vyskytuje se u molekul, které nemají ani střed ani rovinu souměrnosti (stejná pravidla jako u optické izomerie pro organické sloučeniny). Zrcadlové obrazy těchto sloučenin nelze ztotožnit, jsou chirální (levá a pravá ruka).

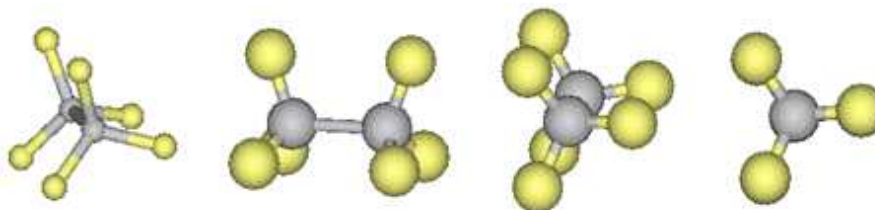


Obr. 2.3.2: optická izomerie pro komplex $[\text{Co}(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)_3]^{3+}$ [4]

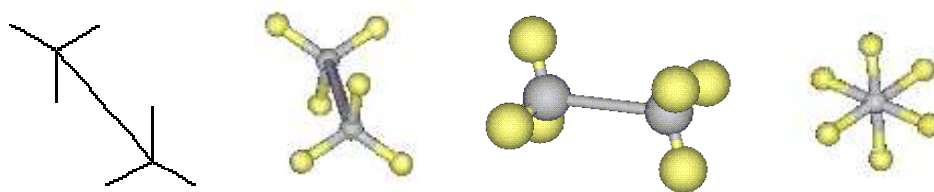
2.4 Konformace

Konformace vyjadřuje různá prostorová uspořádání sloučenin na základě rotace kolem jednoduchých vazeb mezi atomy. Tyto konformace se odlišují energetickým obsahem. U sloučenin umožňuje volná otáčivost energeticky nejvýhodnější stav. Pokud má jedna konformace oproti jiné nižší energii a je tedy výhodnější, bude mít většina molekul v systému tuto konformaci. Konformace lze zobrazit jako prostorový vzorec nebo v Newmanově projekci. U lineárních sloučenin se vyskytuje konformace zákrytová – synperiplanární (viz obr. 2.4.1) a nezákrytová (střídavá) - antiperiplanární (viz obr. 2.4.2), které se liší pouze obsahem energie. Energeticky výhodnější bude konformace nezákrytová (střídavá), protože jsou v ní atomy od sebe maximálně vzdáleny, tím jsou vzájemné interakce minimální. S rostoucí teplotou se zvyšuje rychlost rotace. Pro přechod z jednoho konformeru na druhý stačí pouze malé množství energie. Ve skutečnosti může existovat nekonečně mnoho konformací. Nová konformace vzniká již při nepatrném pootočení kolem jednoduché vazby.

U sloučenin cyklických je omezena schopnost rotace kolem jednoduchých vazeb díky jejich spojení do kruhu. Nejčastěji se uvádí cyklohexanový kruh, který je velice stabilní a existuje ve dvou konformacích: konformace *židličková* (viz obr. 2.4.3) a *vaničková* (viz obr. 2.4.4). Energeticky výhodnější je židličková konformace a většina sloučenin, které obsahují šestičlenné kruhy, zaujímají tuto konformaci. Židličková konformace se vyznačuje dvěma typy vazeb: vazby *axiální* a *ekvatoriální*. Rovnoběžně s osou vystupují z kruhu vazby axiální, naproti tomu vazby ekvatoriální jsou na osu kolmé (viz obr. 2.4.5). Za normálních podmínek (20°C) nejsou konformery cyklické a acyklické příliš stabilní, proto mohou snadno přecházet jeden v druhý.



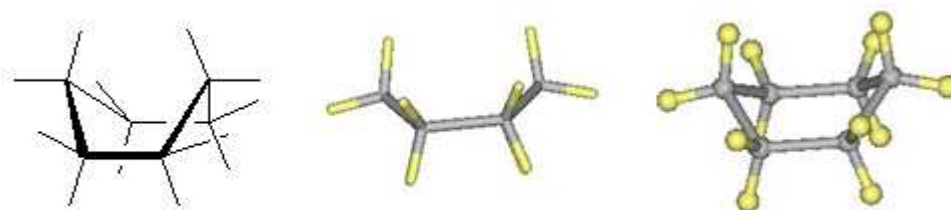
Obr. 2.4.1: zákrytová konformace ethanu



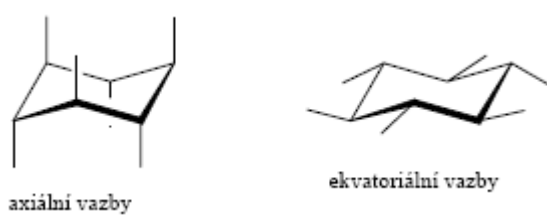
Obr. 2.4.2: nezákrytová konformace ethanu



Obr. 2.4.3: židličková konformace cyklohexanu



Obr. 2.4.4: vaničková konformace cyklohexanu

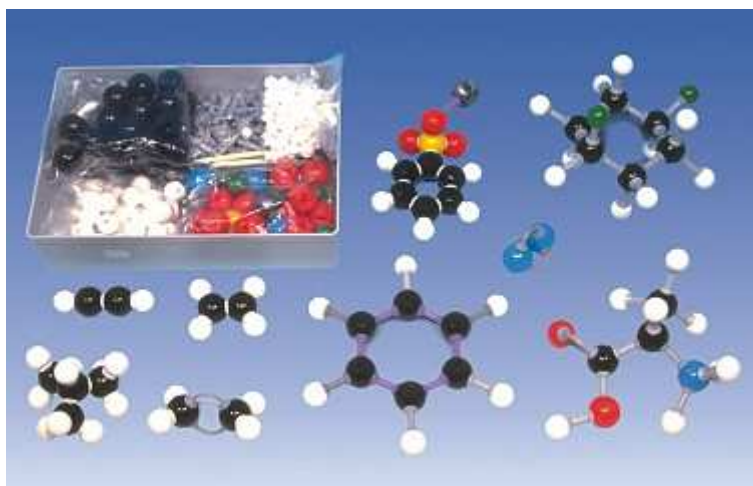


Obr. 2.4.5: axiální a ekvatoriální vazby cyklohexanu

3. MOŽNOSTI VIZUALIZACE

3.1 Úvod

Proč je vůbec důležité prostorovou představivost rozvíjet? Otázka není úplně jednoduchá. Dnešní společnost je především informační. Děti jsou od útlého věku zvyklé na počítače. Nejen si na nich hrát, prohlížet obrázky či pohádky, ale také jejich pomocí vyhledávat určité informace. Není tedy příliš zajímavé hrát si s kostičkami, stavět si různé útvary; stavebnice typu MERKUR či LEGO a některé další již dnes nejsou tolik v oblibě. Ale právě tyto zmiňované aktivity rozvíjejí již od útlého věku prostorovou představivost dětí. Proč je tedy prostorová představivost svým způsobem pro každého jedince tolik důležitá? Potřebujeme ji pro svou každodenní činnost, ať už se jedná o řízení motorových vozidel, pro volnočasové aktivity a také při výuce matematiky na základních a středních školách. Je důležitá v mnoha oborech lidské činnosti. Jedná se o umělce (malíři, sochaři, architekti ...), také ICT pracovníci musí disponovat dobrou prostorovou představivostí. Architekti a programátoři by jistě nebyli schopni vytvářet různé projekty bez schopnosti prostorové představivosti. Samozřejmě, že jsem vyjmenovala jen zlomek toho, kde se s prostorovou představivostí dá operovat, ale jistě by každý z nás vymyslel spoustu dalších činností, při nichž je prostorové představivosti třeba. A není to pouze otázka výuky matematiky ať už na základních, středních či vysokých školách.



Obr. 3.1.1: stavebnice pro organickou chemii [5]

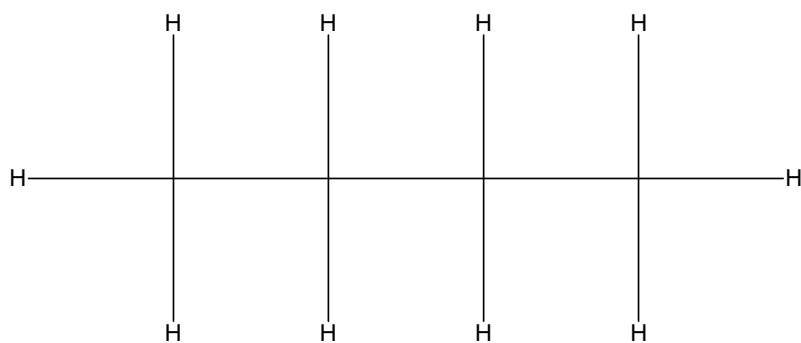
3.2 Možnosti vizualizace

Možností, jak prostorovou představivost rozvíjet, existuje nespočetné množství. Ve své práci představuji pouze zlomek toho, co lze v dnešním světě počítačů využívat. Vybrala jsem si dle svého mínění tři nejvhodnější programy, které mohou používat jak učitelé, tak samotní žáci. Výhodou programů je jejich volná dostupnost na internetu a samozřejmě také velice jednoduché ovládání, které dnešní generace „počítačových“ dětí jistě snadno pochopí. Společným cílem všech těchto programů je možnost práce s modely jednotlivých molekul. To pomáhá žákům uvědomit si, jak se molekula v prostoru chová. Uvědomí si také její tvar v prostoru a některé z toho vyplývající vlastnosti. Další možností je zobrazení v 3D modulu, kde se dá s molekulou nadále pracovat. Programy, které umožňují prostorová zobrazení a na které se zaměřím, jsou ChemSketch, Mercury a ViewerLite.

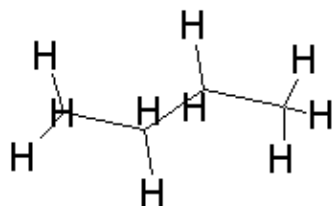
Program **ChemSketch** pochází od kanadské firmy Advanced Chemistry Development a je volně dostupný na internetu již jako verze 12.0. ChemSketch je jednoduše ovladatelný nástroj, jehož používání a možnosti můžeme žákům základních škol vysvětlit během jediné vyučovací hodiny. V tomto programu je možné nakreslit chemickou strukturu (obr. 3.2.1.), kterou lze optimalizovat (obr. 3.2.2.) a převést do další části programu 3D prohlížeče (obr. 3.2.3.). Tato část programu slouží k prostorovému zobrazení molekul, kde lze s danými modely volně otáčet. V programu lze snadno kreslit sloučeniny s kovalentní vazbou – tedy většinu organických sloučenin a vzájemných sloučenin nekovů. Snaha o kreslení iontových sloučenin nemusí vést vždy ke správnému výsledku. Dalšími možnostmi je například měření délky chemických vazeb či vazebných úhlů. Program je též schopen upozornit na chyby ve vaznosti. Možností, jak danou sloučeninu zobrazit, existuje také několik. Lze použít drátový, tyčinkový, kuličkový, kalotový či bodový model zobrazení. Možnou nevýhodou je příliš jednoduchá grafika či nemožnost současně pracovat s více modely.

Žáci by mohli při práci s tímto programem objevit dobrého pomocníka při výuce chemie. Já osobně doporučuji ChemSketch při hodinách chemie využívat velmi často. Další výhodou tohoto programu je, že žáci si mohou buď v hodinách chemie nebo doma ve svém volném čase zakreslit různé molekuly, které potom převedou do prostorového zobrazení, v němž mohou molekulou různě otáčet a uvědomovat si její prostorové uspořádání. Mohou tak srovnávat své vlastní představy

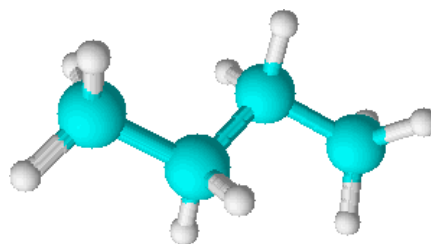
o sloučenině s její reálnou podobou a uvědomit si, s pomocí či radou učitele, proč jednotlivé molekuly mají různé tvary a čím jsou tyto tvary ovlivňované. Aktivní práci s tímto programem si žáci nenásilnou a zábavnou formou rozšíří učivo, a budou tak rozvíjet svou prostorovou představivost. Získají také nové poznatky a utuží si již získané vědomosti o pohybech, tvarech a překryvech různých molekul. Kromě základní práce s tvorbou molekul je zde možné využívat i jiné nástroje programu. Jako velice vhodné se mi jeví okno šablon, z něhož si žáci mohou vybrat jednotlivé kusy laboratorního skla nebo celé aparatury. Další prvky této záložky se již pro základní školu moc nehodí. Jedná se například o zobrazení nejvýznamnějších sacharidů, přehled základních aminokyselin, orbitalů či alkaloidů. 3D prohlížeč programu ChemSketch nabízí další možnosti práce s molekulou. Již zmíněné zobrazení molekul určitými typy modelů, změna barvy jednotlivých atomů prvků, dále měření délky vazby, měření úhlů a automatická rotace molekuly. Výsledek práce lze uložit hned s několika příponami (mol, bmp, pdf, gif...). Pro další práci s vytvořenou strukturou je nejlepší uložit soubor s příponou „mol“. Formát „mol“ byl vytvořen společností MDL, Inc. a umožňuje převod struktur mezi jednotlivými programy. Tento formát slouží pouze k práci s molekulami, a proto není možné uchovávat grafy, obrázky apod. Molekula uložená pod koncovkou „mol“ je plně kompatibilní s dále zmiňovaným programem ViewerLite 5.0. Formát „cml“, neboli CML (Chemical Markup Language = chemický značkovací jazyk) je oproti formátu „mol“ schopný podporovat široký okruh chemických konceptů, a to včetně molekul, reakcí, spekter a analýzy dat, výpočetní chemie a chemické krystalografie. Oproti tomu „mol“ označuje pouze umístění atomů a druhů vazeb v molekule.



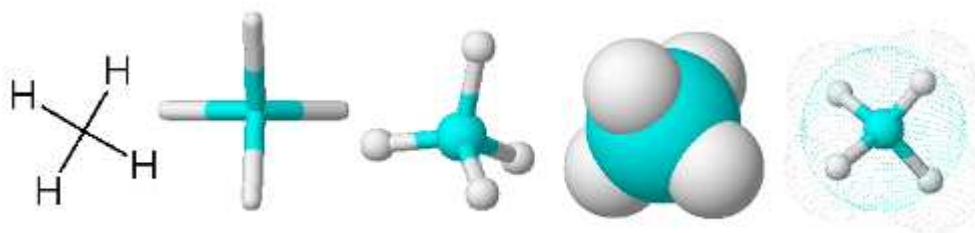
Obr. 3.2.1.: ChemSketch – „Clean Structure“



Obr. 3.2.2.: ChemSketch 3D optimalizace



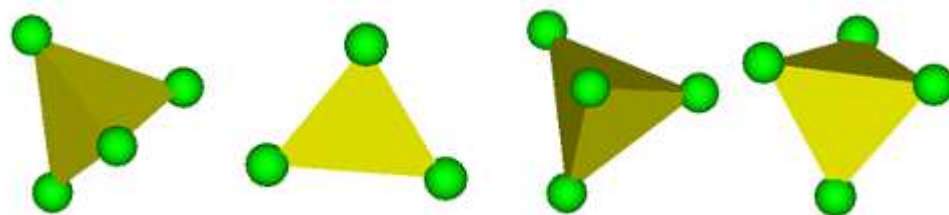
Obr. 3.2.3.: ChemSketch 3D Viewer



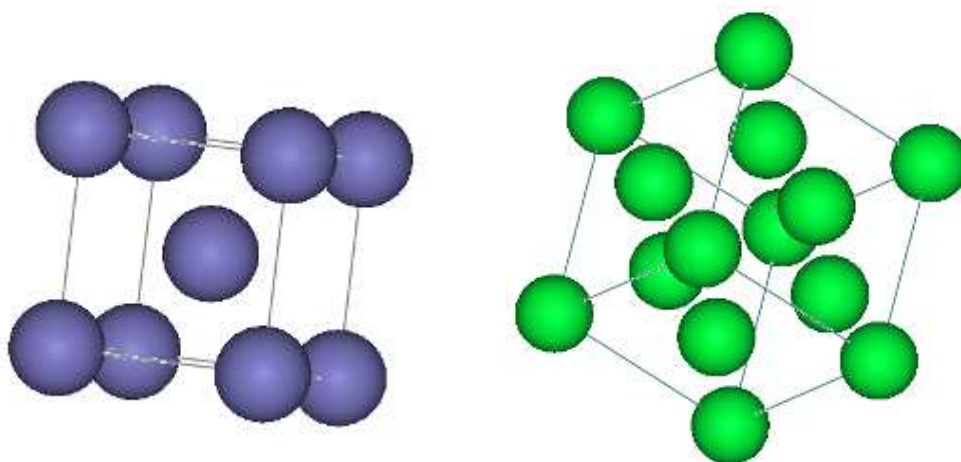
Obr. 3.2.4.: možnosti vizualizace v programu ChemSketch pro molekulu methanu

Dalším velice dobrým programem, který lze v hodinách chemie využít, je **ViewerLite 5.0**. Tento program je též volně dostupný na internetu. Slouží především jako jednoduchá verze prohlížení chemických struktur. Výhodou je hardwarová nenáročnost, dále vysoce kvalitní 3D grafické zobrazení, kompatibilita s některými ostatními chemickými programy a samozřejmě jednoduché ovládání. ViewerLite je velice vhodným programem pro zobrazování struktury molekul a vnitřní stavby krystalů (obr. 3.2.5.). Možnou nevýhodou je pouhá vizualizace a nemožnost tvorby vlastních struktur. To by nám ale nemělo vadit, protože struktury si můžeme vytvořit v programu ChemSketch a vytvořenou molekulu si uložíme s koncovkou „mol“. Tento soubor pak hravě přeneseme do programu ViewerLite. ViewerLite 5.0 se zdá být nejvhodnější pro zobrazování krystalických struktur, pro některé organické sloučeniny a pro mnoho anorganických sloučenin. Další možností jsou volně dostupné databáze krystalových struktur ve formátu „cif“. S jednotlivými krystaly lze nadále pracovat, je možné vložit krystalové osy, pomocí nichž lze měřit parametry buňky (délka os a úhly mezi osami krystalu). Další výhodou oproti programu ChemSketch je rozšířené zobrazení povrchu molekuly. Obrovskou výhodou je

polyedrické zobrazování, které ChemSketch neumožňuje. ViewerLite 5.0 umožňuje také měření délky vazeb (podobně jako ChemSketch).



Obr. 3.2.5.: tetraedrické uspořádání methanu a jeho možné překryvy



Obr. 3.2.6.: elementární krystalové buňky železa a mědi v programu ViewerLite

Posledním programem, který doporučuji, je program **Mercury 1.4.2**. Program slouží podobně jako ViewerLite 5.0 pro vizualizaci struktury molekul a vnitřní stavby krystalů. Podobně jako předešlé programy nabízí také Mercury širokou škálu možností jak pracovat s danou molekulou. Jedná se o měření a o zobrazování vzdáleností, úhlů a torzních úhlů. Možnost záznamu práškového diagramu rozptylu RTG paprsků, včetně přiřazení jednotlivých reflexí, úplné seznamy pozic atomů a délek vazeb. Rozdíl oproti ostatním jmenovaným programům je v možnosti přesného otáčení o 90° a zobrazení mřížek podle krystalografických os. Velice jednoduše lze měřit vzdálenosti a úhly. Pro práci s tímto programem je nutná vlastní databáze struktur s koncovkami „cif“. Program dále umožňuje otevřít soubory s koncovkami podobnými koncovce „cif“, jako jsou „pnr, mol2, mol“.

Již jsem zmínila, že počítače jsou hlavními zájmy dětí a mládeže. Z tohoto důvodu považuji za vhodné, aby některé hodiny chemie probíhaly s využitím počítačů nebo alespoň s jejich podporou. Práce s výše jmenovanými programy není obzvlášť složitá, na jejich obsluhu existují podrobné návody. Tyto programy navíc obsahují modul k zobrazování molekul v prostoru. V prostorovém modulu těchto programů lze pak zobrazovat jednodušší i složité molekuly, s nimiž lze libovolně rotovat a zjišťovat jejich základní parametry, jako např. velikost vazebných úhlů a délku vazeb. Zároveň lze využít možnosti různého zobrazení molekul. Pomocí těchto programů je poté podstatně snazší vysvětlit žákům tvar molekuly, její uspořádání v prostoru a úhly v ní, např. že některé molekuly jsou lomené, jiné rovinné, a co to způsobuje. Dále pomocí modelů vytvořených v těchto programech je možné demonstrovat velikost atomů nebo vysvětlovat látku související s izomerií a geometrií molekul. Žáci prací s těmito programy získají lepší představu o geometrii molekul, jejich vazebných možnostech, reaktivitě a vlastnostech.

Kdybychom si měli shrnout následující programy, jako nejvhodnější se mi pro žáky na základních školách jeví ChemSketch. Nejen díky jeho jednoduchosti, ale především díky možnosti tvorby vlastní databáze sloučenin. Například při výuce uhlovodíků v 9. ročnících by mohl být nenahraditelným pomocníkem pro tvorbu vzorců daných sloučenin. ViewerLite upřednostňuji spíše pro střední školy. Důvodem je prohlížení krystalických struktur, se kterými žáci na základní škole příliš neoperují. Výhodou je samozřejmě polyedrické zobrazení, které nám ChemSketch nenabízí. Poslední program Mercury 1.4.2. bych používala spíše doplňkově pro žáky s větším zájmem o chemii a v hodinách přírodopisu v 9. třídě (geologii).

4. MNOHOSTĚNY A TEORIE VSEPR

4.1 Mnohostěny (polyedry)

Mnohostěny se zabývali již staří Řekové zhruba v době 4. století př. n. l., konkrétně Platón považoval některé z nich za základní symboly pro zemi, vzduch, oheň a vodu. Všechny stěny mnohostěnu jsou shodné stejně jako jejich úhly a délky stran. V každém vrcholu mnohostěnu se stýká stejný počet stěn a hran. Těmto tělesům lze vepsat i opsat kulovou plochu, přičemž obě kulové plochy mají společný střed. V prostoru se dá sestavit pouze pět pravidelných mnohostěňů. Jedná se

o čtyřstěn (tetraedr), šestistěn (hexaedr), osmistěn (oktaedr), dvanáctistěn (dodekaedr) a dvacetistěn (ikosaedr).

Pravidelný čtyřstěn (též pravidelný trojboký jehlan, tetraedr) má čtyři vrcholy a čtyři stěny tvořené shodnými rovnostrannými trojúhelníky. Podle Platóna byl čtyřstěn symbolem ohně.



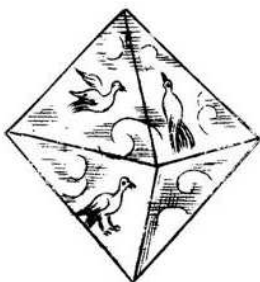
Obr. 4.1.1: pravidelný čtyřstěn jako symbol ohně (Platón) [6]

Pravidelný šestistěn (též krychle) má osm vrcholů a šest stěn tvořených shodnými pravidelnými čtyřúhelníky (tj. čtverci). Podle Platóna byl šestistěn symbolem země.



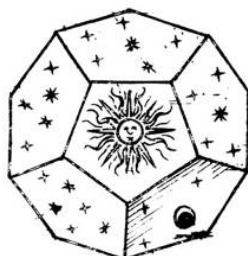
Obr. 4.1.2: pravidelný šestistěn jako symbol země (Platón) [7]

Pravidelný osmistěn má šest vrcholů a osm stěn tvořených shodnými rovnostrannými trojúhelníky. Podle Platóna byl osmistěn symbolem vzduchu.



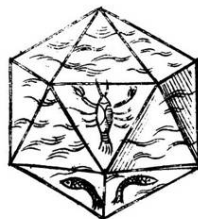
Obr. 4.1.3: pravidelný osmistěn jako symbol vzduchu (Platón) [8]

Pravidelný dvanáctistěn má dvacet vrcholů a dvanáct stěn tvořených shodnými pravidelnými pětiúhelníky. Podle Platóna představoval jsoucnost nebo vesmír.

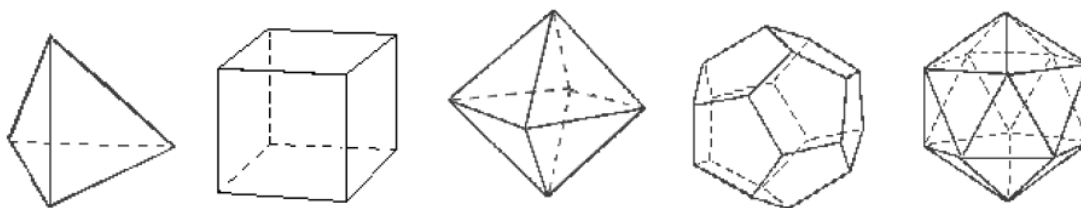


Obr. 4.1.4: pravidelný dvanáctistěn jako symbol vesmíru (Platón) [9]

Pravidelný dvacetistěn má dvanáct vrcholů a dvacet stěn tvořených shodnými rovnostrannými trojúhelníky. Podle Platóna byl dvacetistěn symbolem vody.



Obr. 4.1.5: pravidelný dvacetistěn jako symbol vesmíru (Platón) [10]



Obr. 4.1.6: pravidelné mnohostěny [11]

Za krátkou zmínku ještě stojí poloprávidelné mnohostěny:

Poloprávidelnými mnohostěny nazýváme takové mnohostěny, jejichž stěny jsou tvořeny pravidelnými mnohoúhelníky dvou nebo tří typů a jejichž vrcholy jsou stejného typu (tj. v každém vrcholu se setkává ve stejném pořadí stejný počet stěn téhož typu). Těchto těles známe patnáct, z toho třináct jich odvodil Archimédés

z platónských těles odřezáváním vrcholů nebo hran (tato tělesa se nazývají Archimédova). Pro chemii nejtypičtějším příkladem je tzv. truncated icosahedron (ořezaný dvacetistěn), který je modelem stabilní molekuly uhlíku. Fulleren C_{60} , má totiž 60 atomů umístěných právě ve vrcholech tohoto tělesa:



Obr. 4.1.7: model fullerenu C_{60} [12]

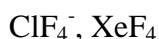
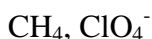
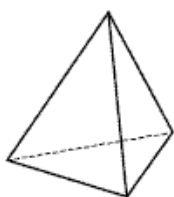
4.2 Teorie VSEPR

Další pro nás potřebné struktury se rozlišují podle koordinačního čísla. Koordinační číslo udává počet ligandů, které obklopují centrální atom a jsou vázány vazbou sigma. Nejčastějším koordinačním číslem centrálního atomu je číslo 4 nebo 6. Pro koordinační číslo 4 je typické uspořádání tetraedrické a čtvercové. Koordinační číslo 5 zaujímá čtvercová a trigonální bipyramida. Nejběžněji se vyskytuje koordinační číslo 6, a to jako oktaedr a trigonální prizma. Následuje koordinační číslo 7 jako pentagonální bipyramida a útvary odvozené od oktaedru a trigonálního prizmatu. Poslední pro nás důležitým koordinačním číslem je číslo 8 jako krychle, dodekaedr a čtvercové antiprizma.

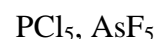
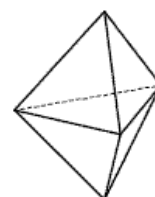
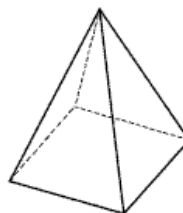
Obr. 4.2.1 [13]:

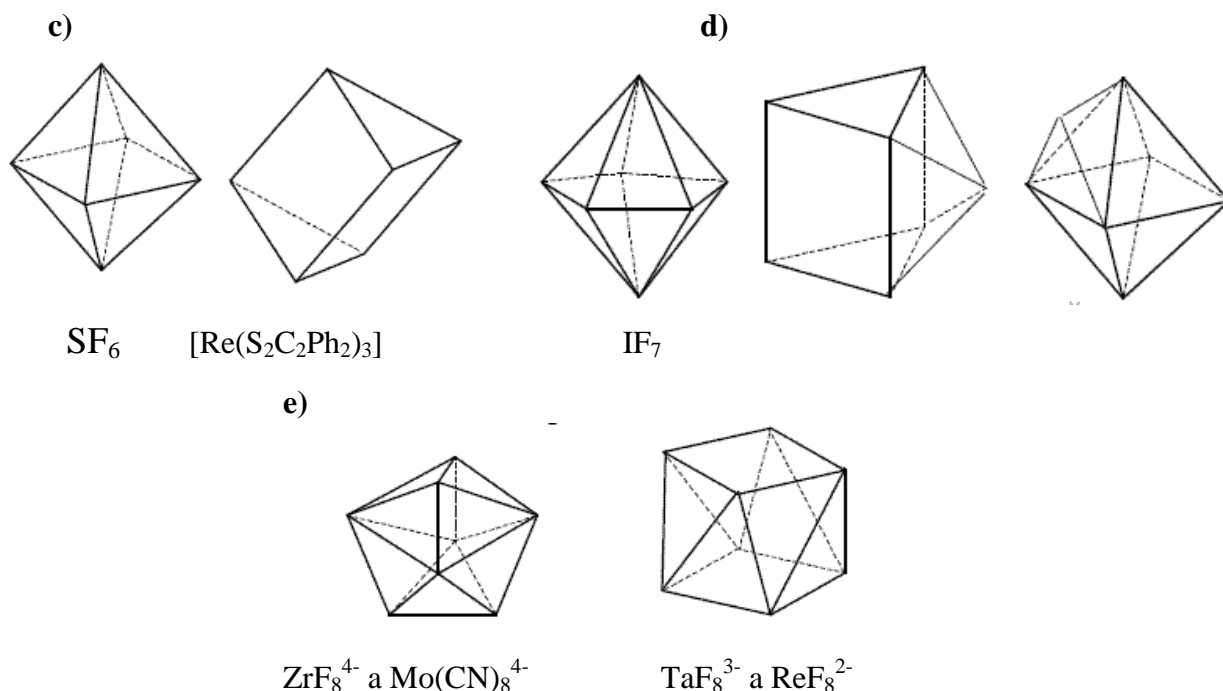
- tetraedrické a čtvercové uspořádání pro koordinační číslo 4
- čtvercová a trigonální dipyramida pro koordinační číslo 5
- oktaedr a trigonální prizma pro koordinační číslo 6
- pentagonální bipyramida a útvary odvozené od oktaedru a trigonálního prizmatu pro koordinační číslo 7
- krychle, dodekaedr a čtvercové antiprizma pro koordinační číslo 8

a)



b)





Před vlastním použitím některých příkladů pro rozvoj prostorové představivosti by bylo dobré alespoň ve stručnosti zmínit základy teorie VSEPR (valence shell electron repulsion). Jedná se o odpuzování elektronových párů ve valenční vrstvě. Dle Klikorky (1989) je pro základní tvar molekuly rozhodující číslo, které udává součet vazebných a nevazebných elektronových párů umístěných na centrálním atomu. Vazebné i nevazebné elektronové páry jsou v prostoru umístěny tak, aby zaujímaly co nejnižší energii, a tím se co nejméně odpuzovaly. Klikorka dále tvrdí, že nevazebný pár odpuzuje ostatní elektrony více než vazebný a u násobných vazeb je odpuzování ještě větší (přítomnost dalších elektronů než u vazby jednoduché). Tvary molekul nebo iontů pak vycházejí z těchto uspořádání.

CENTRÁLNÍ ATOM + POČET LIGANDŮ	TVAR MOLEKULY
centrální atom + 2 ligandy	lineární
centrální atom + 3 ligandy	rovnostranný trojúhelník
centrální atom + 4 ligandy	tetraedr
centrální atom + 5 ligandů	trigonální bipyramida nebo čtvercová pyramida
centrální atom + 6 ligandů	oktaedr
centrální atom + 7 ligandů	pentagonální bipyramida

Tab. 4.2.1: tvar molekuly na základě teorie VSEPR

TYP HYBRIDIZACE	SKUTEČNÝ TVAR MOLEKULY	ODVOZENÝ TVAR MOLEKULY
AB ₂	lineární BeCl ₂ , CO ₂ , HgCl ₂	ABE (lineární)
AB ₃	rovnostanný trojúhelník BCl ₃ , NO ₃ ⁻	AB ₂ E (lomený / tvar V) - O ₃ , SO ₂
		ABE ₂ (lineární)
AB ₄	tetraedr CH ₄ , ClO ₄ ⁻ , SO ₄ ²⁻	AB ₃ E (trigonální pyramida) - NH ₃ , PF ₃
		AB ₂ E ₂ (lomený / tvar V) - H ₂ O, H ₂ S, SCl ₂
		ABE ₃ (lineární) - HCl, OH ⁻
AB ₅	trigonální dipyramida PCl ₅ , AsF ₅	AB ₄ E (deformovaný tetraedr / houpačka) - SF ₄
		AB ₃ E ₂ (tvar T) - ClF ₃ , BrF ₃
		AB ₂ E ₃ (lineární) - XeF ₂
		ABE ₄ (lineární)
AB ₆	oktaedr	AB ₅ E (tetragonální pyramida) - ClF ₅ , BrF ₅ , IF ₅
	(tetragonální bipyramida)	AB ₄ E ₂ (čtverec) - ClF ₄ ⁻ , XeF ₄
	SF ₆ , SeF ₆	AB ₃ E ₃ (trigonální pyramida) - XeF ₃ ⁻
		AB ₂ E ₄ (lomený / tvar V)
		ABE ₅ (lineární)

A - centrální atom

B - sousední atomy

E - volný elektronový pár

Tab. 4.2.2: tvary molekul odvozené z modelu VSEPR

5. NÁMĚTY K ROZVOJI PROSTOROVÉ PŘEDSTAVIVOSTI

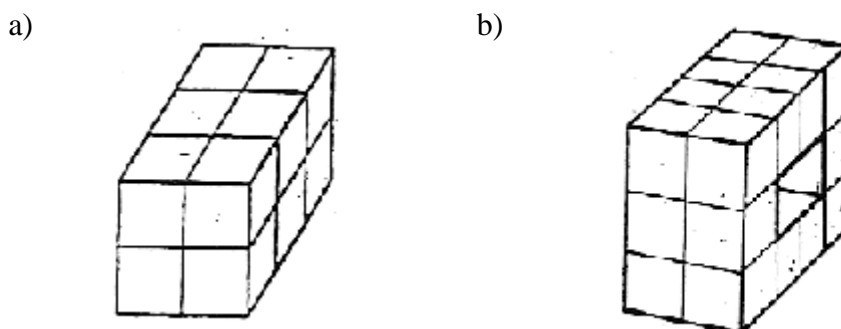
5.1 Úvod

Metody pro testování prostorové představivosti v chemii nejsou doposud řádně zpracovány a publikovány. V této části se pokusím nastínit problematiku rozvoje prostorové představivosti v chemii pro základní a střední školy. Drtivá většina žáků a studentů má dnes doma počítač a také internet. Pomocí jednoduchých programů jako ChemSketch a ViewerLite žáci mohou nejen ve školách, ale i doma plnit některé úkoly. Především si ale sami vyzkouší mnoho dalších věcí. V programu ChemSketch je možné nakreslit chemickou strukturu, kterou optimalizujeme a převedeme do části programu, který slouží k prostorovému zobrazení molekul. S ViewerLitem se za pomoci učitele pokusí žáci vytvářet krystalové struktury

některých prvků či sloučenin. Možností, které tyto programy nabízí, je opravdu mnoho. V této práci jsem se ale především zaměřila na konkrétní testování, co se prostorové představivosti týče. Nejprve se budu věnovat něčemu jednoduššímu. Začnu s prostorovými úlohami prof. Dr. Barkem (2001). Dále se budu věnovat hlavně strukturám sloučenin, které se vztahují k výuce na školách. Touto formou mohu docílit toho, že žáci snad získají k chemii lepší vztah a zcela jistě si osvojí některá pravidla, která vyplynou z jejich samotné práce. A kde jinde rozvíjet prostorovou představivost, než u některých vybraných sloučenin, se kterými se denně setkává každý z nás?

5.2 Krystalové mřížky

Mezi další možnosti orientace v prostoru patří jednoduché krystalové mřížky. I tuto problematiku lze využít při práci s programy. Zde doporučuji hlavně ViewerLite, popřípadě Mercury. Práce s krystalovými mřížkami je poměrně náročná. Žáci si mohou vyzkoušet podobně jako v předchozích případech s mřížkami otáčet. Uvědomí si, jaká část atomu leží v elementární buňce a jaká mimo ni. Tímto testováním se zabýval německý Prof. Dr. Hans-Dieter Barke. Zaměřuje se na prostorovou představivost, která pracuje s krychlemi, krystalovými mřížkami a s koulemi. Využijeme tedy jeho myšlenku pro práci s krystalovými mřížkami. Nejprve se však podíváme na jednoduché úlohy pro rozvoj představivosti, které můžeme aplikovat již v nižších třídách základní školy, tedy například v hodinách matematiky nebo i fyziky. Tyto úlohy se skládají z jednoduchého sčítání krychlí v daném útvaru (viz obr. 5.2.1 a)). Úloh tohoto typu existuje mnoho, za zmínku stojí úlohy postavené na chybějící části útvaru (viz obr. 5.2.1 b)).



Obr. 5.2.1: úlohy pro skládání krychlí [14]

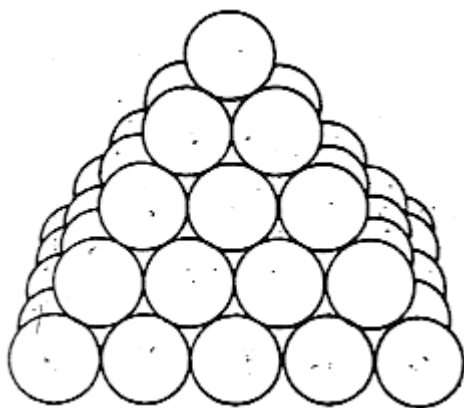
a) Z kolika krychlí se skládá tento prostorový útvar?

U kolika krychlí jsou vidět pouze dvě boční stěny?

b) Kolik krychlí tento útvar s prázdným prostorem obsahuje?

Kolik krychlí je potřeba k vyplnění prázdného prostoru v tomto útvaru?

Kromě útvarů sestavených z krychlí se Barke věnuje i modelům poskládaných z koulí. Princip rozvoje prostorové představivosti je stejný jako v úlohách předchozích. Žák musí nejprve spočítat, z kolika koulí se útvar skládá, a na to pak navazují úlohy složitější (viz obr 5.2.2).



Obr. 5.2.2: úlohy pro skládání koulí [15]

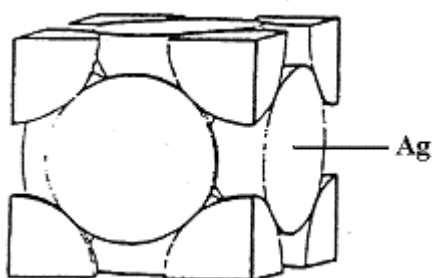
a) Z kolika koulí se skládá tento útvar?

b) Kolik koulí obsahuje vnitřní část útvaru a nejsou vidět zvenku?

c) Kolik koulí se dotýká koule umístěné uprostřed útvaru?

Tyto úlohy jsou poměrně jednoduché a dá se s nimi pracovat na základních školách. Barke se také zaměřuje na úlohy složitější, které se konkrétně týkají chemie. Jedná se o studium jednotlivých kuličkovitých částí (atomů) v krystalových mřížkách. Jsou to úlohy typu: kde se v konkrétním modelu krystalické struktury nachází kulička celá, popřípadě kde kulička poloviční a kolik jich je v celém modelu krychle, na kolik dílů se dělí kuličky v rozích krychle. Takto zaměřené testy můžeme aplikovat na další modely (viz obr. 5.2.3).

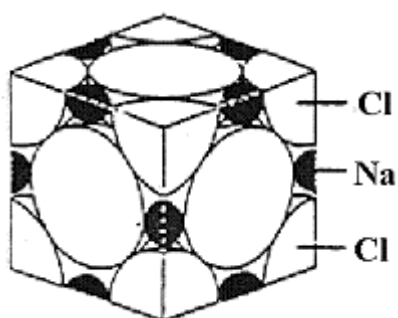
a) Elementární buňka krystalové mřížky atomu stříbra.



Kolik $\frac{1}{8}$ koulí Ag zobrazená mřížka obsahuje?

Kolik polokoulí Ag zobrazená mřížka obsahuje?

b) Elementární buňka struktury chloridu sodného NaCl.

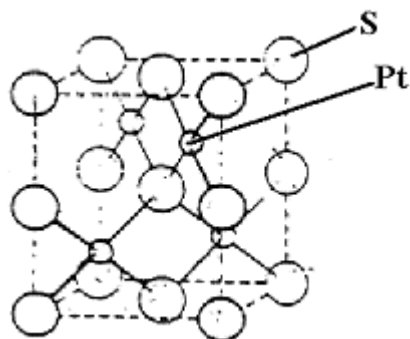


Kolik chloridových koulí lze sestavit ze znázorněných částí?

Kolik $\frac{1}{4}$ koulí Na^+ mřížka obsahuje?

Kolik sodíkových koulí lze sestavit ze znázorněných částí?

c) Struktura sloučeniny platiny se sírou.



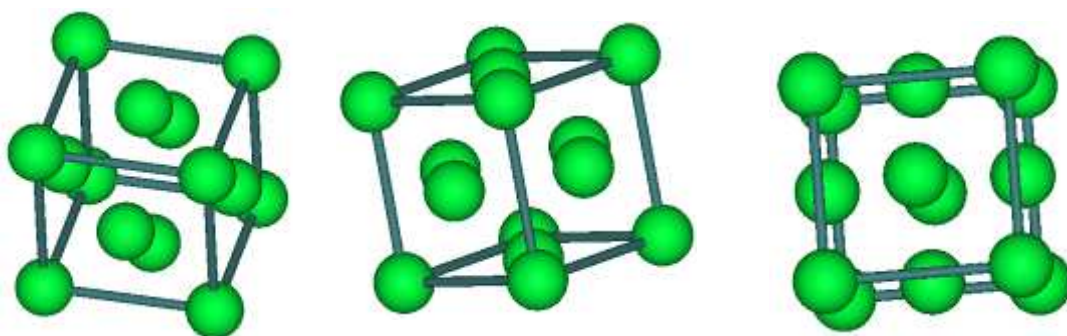
Kolik polokoulí síry bude mřížka obsahovat?

Kolik $\frac{1}{4}$ koulí síry bude mřížka obsahovat?

Z kolika celých koulí síry se bude mřížka skládat?

5.2.3: možnosti testování krystalových mřížek [16]

Vlastní náměty pro testování prostorové představivosti jsem sestavila pomocí programu ViewerLite. Opět se jedná o práci s krystalovými mřížkami a výpočtem jednotlivých částí atomů, které zasahují do mřížky celé, nebo se nacházejí svou polovinou, čtvrtinou či osminou uvnitř i vně buňky. Jako první jsem použila poměrně jednoduchou elementární buňku mědi (viz obr. 5.2.4).

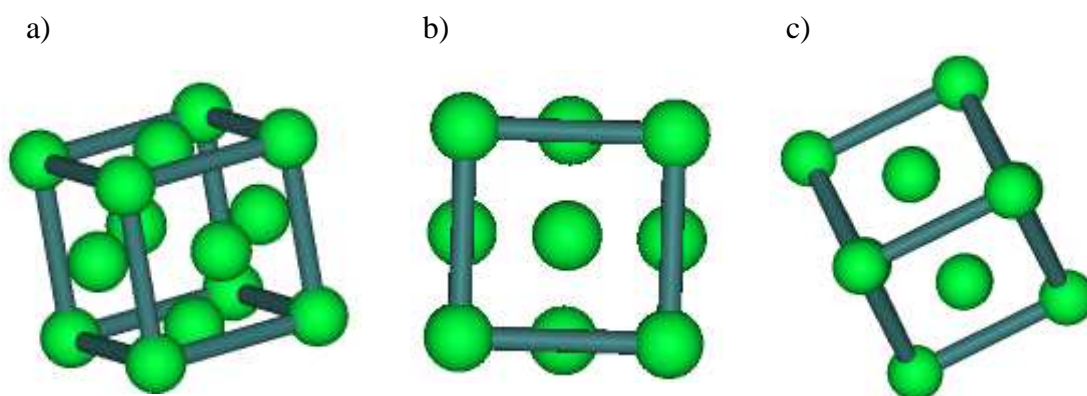


Obr. 5.2.4: model krystalové mřížky Cu

U elementární buňky mědi budeme počítat počet půlených kuliček a dělení kuliček v rozích krychle. Dále se dá spočítat, jak velkou částí zasahují jednotlivé kuličky mimo mřížku a naopak, které sahají dovnitř.

Zadání úlohy:

V elementární buňce najděte a spočítejte atomy, které patří polovinou do elementární buňky, a vypočítejte, jaké části zbývajících atomů patří dovnitř buňky. Na závěr se pokuste spočítat, jaké části atomů se nacházejí mimo elementární buňku.



Obr. 5.2.5: další pomocná schémata se zesílenou mřížkou

Řešení:

ELEMENTÁRNÍ BUŇKA: krystalová mřížka mědi obsahuje 6 stěn s půleným atomem.

$$6 \times \frac{1}{2} = 3 \text{ atomy}$$

Dále 8 rohů, kde jsou atomy $\frac{1}{8}$ v elementární buňce.

$$8 \times \frac{1}{8} = 1 \text{ atom}$$

V elementární buňce se nachází dohromady 4 atomy.

ATOMY MIMO ELEMENTÁRNÍ BUŇKU:

Šest půlených atomů se nachází na stěnách buňky

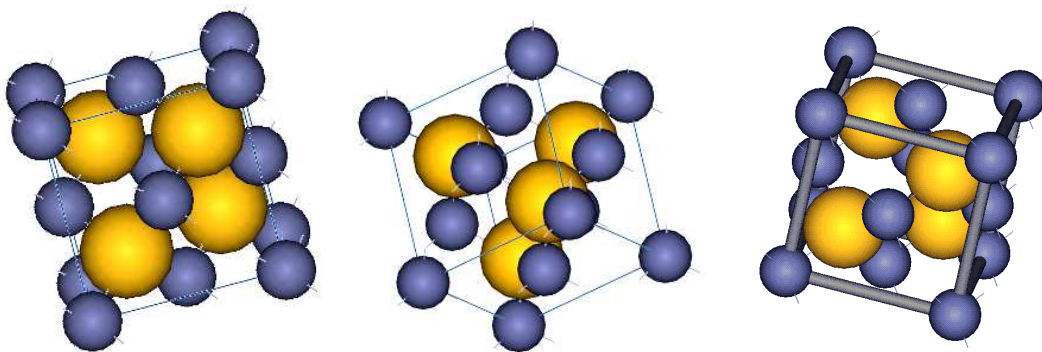
$$6 \times \frac{1}{2} = 3 \text{ atomy}$$

Vně se nachází $\frac{7}{8}$ v osmi rozích buňky

$$\frac{7}{8} \times 8 = 7 \text{ atomů}$$

Mimo elementární buňku se nachází 10 atomů.

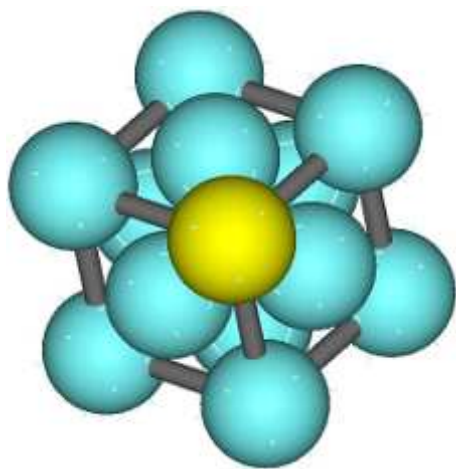
První pohled na elementární buňku mědi (viz obr. 5.2.5) za a) ukazuje správnou strukturu mřížky bez zakrytých atomů. Při druhém pohledu obr. za b) se na mřížku koukáme seshora, ale ještě pořád je možné přesně určit, o jaký typ mřížky se jedná. Pouze v případě za c) je mřížka natočena tak, že vypadá jako úplně jiná buňka. Atomy, které jsou umístěny uprostřed jednotlivých stěn jsou v zákrytu a proto není možné určit správnou strukturu. Tyto obrázky ale slouží pouze pro jednoduché výpočty jednotlivých atomů. Kdybychom chtěli vytvořit složitější úlohy, dají se postavit právě na různých zákrytech těchto atomů. Další možností je, aby žáci určili, jestli se jedná o prostorový útvar nebo o útvar plošně zobrazený viz obr. 5.2.5 za b) i za c). Tato mřížka se skládá pouze z jednoho druhu atomů. Podobné úlohy se ale stejně tak dají vytvářet pro složitější mřížky (mřížky, které obsahují například dva druhy atomů). Dobrým příkladem je sulfid zinečnatý ZnS viz obr. 5.2.6. V případě ZnS budeme při výpočtu jednotlivých atomů postupovat zcela shodně. Pro správný výpočet bude ale důležité, aby si žáci uvědomili, které atomy náleží zinku a které síře. Výsledky výpočtu, co se atomu zinku týče, budou naprosto shodné. Atomy síry budou všechny čtyři náležet do elementární buňky.



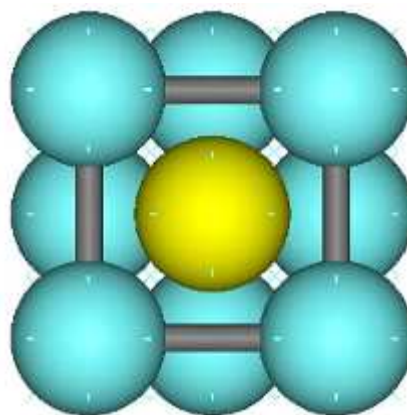
Obr. 5.2.6: model krystalové mřížky ZnS

Možností, jak sestavit test prozkoušení prostorové představivosti, je hned několik. Modely jednoduchých sloučenin a modely krystalových mřížek umožňují prozkoušet prostorovou představivost hned několikrát. Považuji za důležité, aby si žáci nejprve sami zkusili se jmenovanými programy pracovat, vyzkoušet si tvorbu několika jednoduchých sloučenin, otáčet si s nimi a sledovat, jak se jednotlivé části mohou překrývat. Využijí tak svých vědomostí při studiu chemie. Byla bych ráda,

kdyby se podobný systém práce využíval alespoň na některých školách, a oživil tak výuku chemie a zájem žáků o ni. Pro rozvoj prostorové představivosti lze použít i cvičení na hledání symetrií například u krystalu mědi. Obrázek 5.2.7 a) - centrálním atomem (zvýrazněn žlutou barvou) lze proložit osou tři roviny, z nichž každá ze jmenovaných rovin rozdělí krystal na dvě symetrické části. Stejně tak budeme pracovat s obrázkem 5.2.7 za b) pouze s tím rozdílem, že centrálním atomem proložíme čtyři roviny a každá z těchto rovin krystal rozdělí na dvě symetrické části. Tato cvičení jsou vhodná k procvičení pochopení prostorového uspořádání krystalu. Pro hledání symetrií lze pracovat samozřejmě i s jednoduššími sloučeninami. U těchto úloh je nejlepší využít program ViewerLite nebo Mercury. Jak jsem zmínila výše, pro program ViewerLite existují volně dostupné databáze krystalových struktur, které si žáci na internetu vyhledají sami. Tím se usnadní práce učiteli, který může žákům zadávat úkoly s mřížkami i domů. Vhodný je také program Mercury, který jako jediný ze jmenovaných programů umožňuje přesné otáčení o 90° a zobrazení podle krystalografických os.



a) trojčetná symetrie



b) čtyřčetná symetrie

Obr. 5.2.7: zvýraznění centrálního atomu u krystalu mědi (žlutá barva)

Souměrnost patří k nejdůležitějším vlastnostem krystalů. Na drtivé většině ideálně vyvinutých krystalů lze pozorovat pravidelné opakování určitého motivu (krystalových ploch, hran, rohů). Toto opakování je odrazem souměrného uspořádání základních stavebních jednotek v krystalové struktuře. Osa souměrnosti prochází středem krystalu. Otáčením kolem této osy o 360° převádíme krystal několikrát do pozice stejnocenné s pozicí výchozí. Podle toho, kolikrát přejde krystal při otočení

o 360° do stejnocenné pozice (= jedná se o plochy, hrany nebo rohy, které se na krystalu pravidelně opakují), rozlišujeme dvojčetnou, trojčetnou, čtyřčetnou a šestičetnou osu souměrnosti. Chybí zde ale osa pětičetná a všechny osy s četností vyšší než šest. Nemožnost existence těchto os na krystalech má strukturní důvod: totožnými pravidelnými pětiúhelníky, sedmiúhelníky atd. nelze žádným způsobem zcela vyplnit plochu, vždy mezi nimi zůstane prázdné místo. Krystalovou mřížku proto nelze složit z pravidelných pětiúhelníků, sedmi- a víceúhelníků. Ve světě živé přírody se s těmito symetriemi setkáváme poměrně běžně.

Jak můžeme testovat úroveň prostorové představivosti:

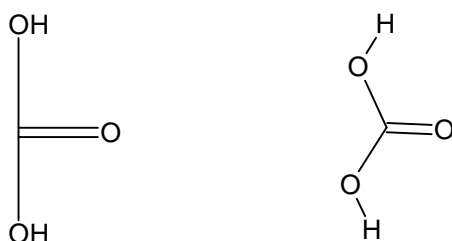
Samozřejmě můžeme přejímat již publikované testy. Kreativní učitel si může vytvořit vlastní skupiny otázek na základě modelů, s nimiž se žáci seznámili. Testy mohou být uskutečněny na 2D obrázcích probíraných struktur, nebo výhodněji přímo v 3D verzi na počítačích.

5.3 Využití vizualizačních programů pro jednoduché sloučeniny

V této části se budu zabývat vlastními náměty různých sloučenin pro rozvoj prostorové představivosti, které se dají využít na základních školách, ale především na školách středních. Pro představu nastínění problému použijeme jednoduchý uhlovodík methan. Seznámíme se nejprve s jednoduchými grafickými modely methanu, poté je možné zkusit si s touto sloučeninou v programu ChemSketch lehce otáčet a zakrývat si její jednotlivé části. Žáci si tak mohou zkusit i jiné pohledy na tuto sloučeninu než jen klasický frontální pohled. Zjistí tak, že po přetočení může tato sloučenina vypadat zcela jinak. Při práci s tímto programem si uvědomí, že molekuly v prostoru mohou vytvářet tvary, které připomínají zcela jiné sloučeniny. V prostoru totiž dochází k překryvům a některé části molekuly mohou být zakryté a z daného úhlu nepozorovatelné. Pro přesnější znázornění je lepší použít hned několik typů modelů, protože některé z modelů mohou zakrývat důležité vlastnosti (jedná se například o existenci vazeb a jejich prostorové směřování). Překryv v mé terminologii znamená zakrytí jednoho nebo více atomů či vazby dané sloučeniny, který není na první pohled viditelný. Proto je důležité nespoléhat se pouze na jeden pohled na sloučeninu, ale na zobrazení z více stran. Pokud se člověk spokojí pouze s jedním z náhledů, docházelo by velmi často k chybným závěrům. Tím pak vznikají zcela jiné

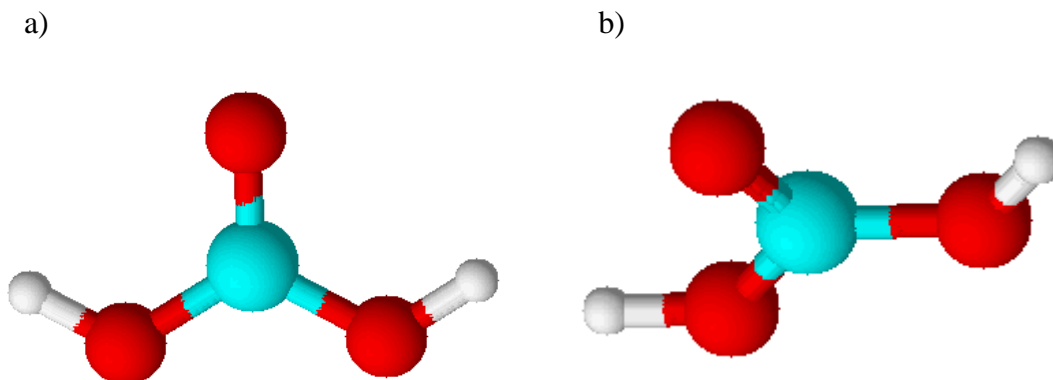
sloučeniny nebo sloučeniny, které za normálních podmínek existovat nemohou díky nesprávné vaznosti i absenci některých atomů. Nebo se naopak může objevit sloučenina, která by měla více významů (methan versus prop-1,2-dien). Na tento fakt je důležité žáky upozornit. Ani počítačový program není neomylný a je bezpochyby potřeba lidského faktoru.

Pro názorný příklad využijeme molekulu kyseliny uhličitě H_2CO_3 . Studenti by měli umět nakreslit strukturní vzorec dané sloučeniny a následně si uvědomit, že se v molekule vyskytují volné nevazebné elektronové páry, které tvar molekuly výrazně ovlivňují (viz obr. 5.3.1).

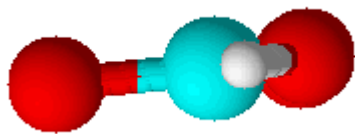


Obr. 5.3.1: strukturní vzorec a elektronový vzorec H_2CO_3

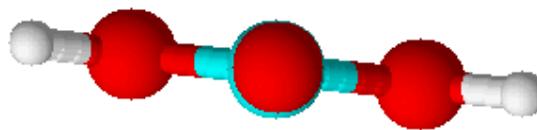
Provedení předcházejících kroků má studenty vést ke zjištění, že molekuly mají svůj specifický tvar. Zakreslení lomené molekuly na papír ukazuje, že molekulou lze pohybovat i v prostoru (viz obr 5.3.2). V případě kyseliny uhličitě se jedná o plošnou molekulu, což je patrné z obr. 5.3.2. Obr. za a) vystihuje takové zobrazení molekuly, kterým lze proložit osu souměrnosti (konkrétně atomem uhlíku). Obrázky 5.3.2. za c) a d) zobrazují možné překryvy některých atomů ve sloučenině tak, že v případě za c) je zakryt jeden atom vodíku (bílá barva) a v případě za d) se za atomem kyslíku (červená barva) skrývá atom uhlíku (modrá barva).



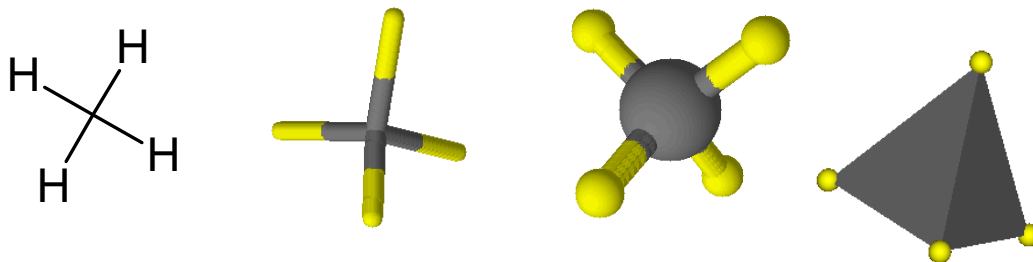
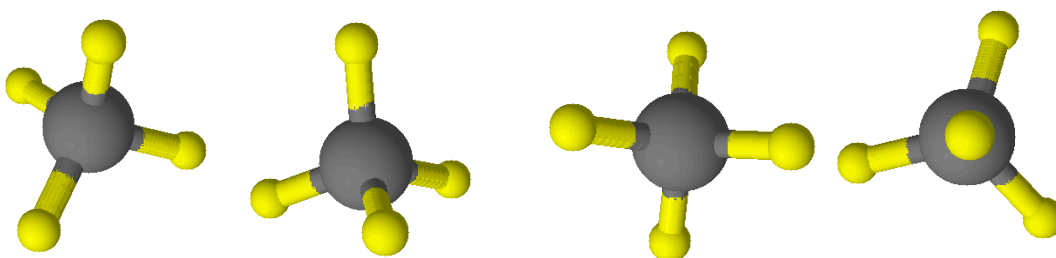
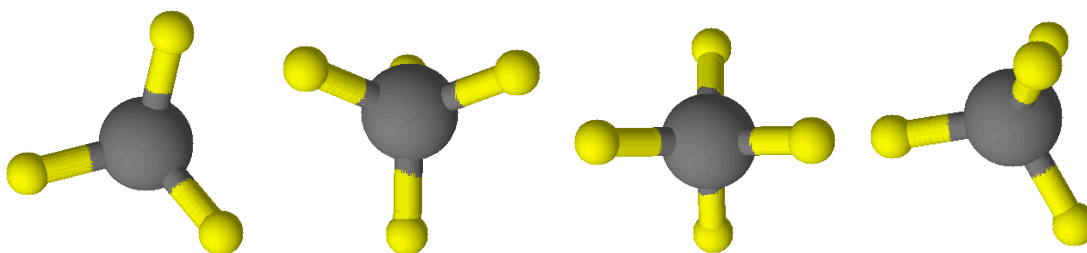
c)



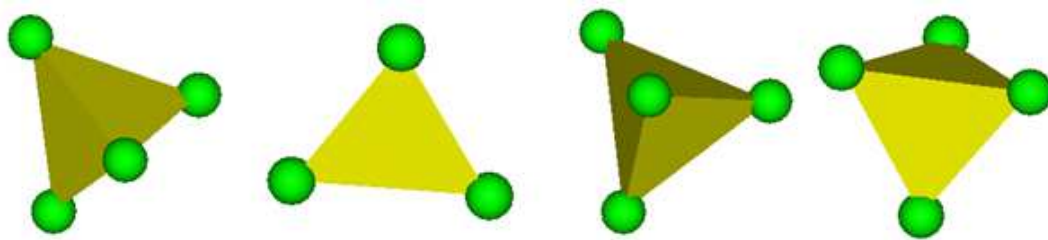
d)

Obr. 5.3.2: molekula H_2CO_3 a možné překryvy

Přejdu ale k prostorovým sloučeninám, mezi které zařadím některé jednoduché sloučeniny uhlíku (především uhlovodíky a jejich deriváty), které se nezobrazují v prostoru plošně jako kyselina uhličitá, ale jako prostorové útvary. Konkrétně methan je nejjednodušším představitelem uhlovodíků a v prostoru se zobrazuje pomocí programu ViewerLite jako pravidelný čtyřstěn – tetraedr (viz obr. 5.3.3). Žáci ale mají problémy u methanu poznat tvar tetraedru, přitom se jedná o jednoduchou sloučeninu. Prostorové zobrazení jednoduchých sloučenin lze v hodinách chemie trénovat pomocí různých chemických stavebnic (viz obr. 3.1.1).

Obr. 5.3.3: model CH_4 a jeho možnosti grafického zobrazeníObr. 5.3.4: model CH_4 a jeho prostorové uspořádání z různých úhlů pohledu

Obr. 5.3.5: možné situace překryvů



Obr. 5.3.6: tetraedrické uspořádání methanu a jeho možné překryvy

Při hrátkách s methanem je možné žákům uložit hned několik úkolů.

Pohrajte si s modelem methanu tak, aby byl zakryt jeden jeho vodík (viz obr. 5.3.4 a 5.3.5). O jakou jinou sloučeninu (v našem případě raději uhlovodík) se bude jednat v případě, že tato sloučenina obsahuje pouze tři vodíky? Je vůbec možné, aby taková sloučenina existovala? Dokážete z obrázků tetraedrického uspořádání vyčíst, zda se jedná o tetraedr či o plošné zobrazení?

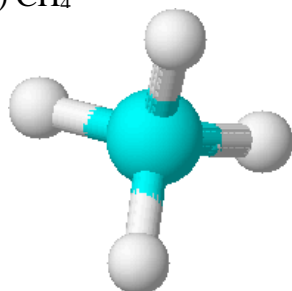
Žáci se mohou zamyslet nad tím, že to co vidí, nemusí vždy znamenat opravdovou strukturu dané sloučeniny. Při konkrétní práci v hodinách chemie by bylo dobré s modelem pomalu otáčet, ukazovat si různé úhly pohledu na sloučeninu nebo postupně zakrývat její jednotlivé části. A to tak, aby si žáci uvědomili, jak se molekula v prostoru chová, co se stane, když s ní pootočíme na jednu či druhou stranu. Co se mění, co se „schová“, který z atomů nám z prostoru vystupuje atd. Nejvhodnější se mi jeví zobrazování molekul v kuličkovém modelu. Tyčinkový ani drátový není pro tyto příklady příliš vhodný, protože překryvy nejsou tak dobře viditelné. Pouze u složitějších sloučenin je tyčinkový model výhodou, protože se dá schovat i více atomů najednou. Kalotový model je pro tyto příklady zase příliš mohutný.

Konkrétní příklady pro rozvoj prostorové představivosti s využitím programu ChemSketch a ViewerLite:

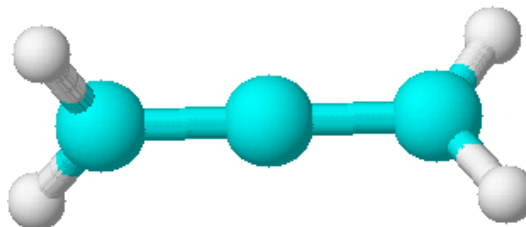
A. Možná záměna methanu s prop-1,2-dienem - pootočíme-li v prostoru s molekulou prop-1,2-dien, zjistíme, že z určitého úhlu pohledu vypadá jako molekula methanu. Důležité je uvědomit si, že v případě prop-1,2-dienu sloučenina obsahuje

dvě dvojné vazby, které nejsou z obrázku patrné. Proto působí druhý uhlík jako by byl pouze dvojitý. K tomuto příkladu je nutné pro žáky uvést i strukturní vzorec.

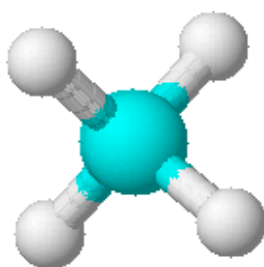
a) CH_4



b) prop-1,2-dien

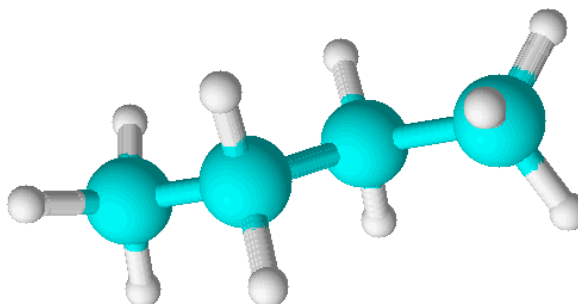


Obr. 5.3.7: model methanu a prop-1,2-dienu

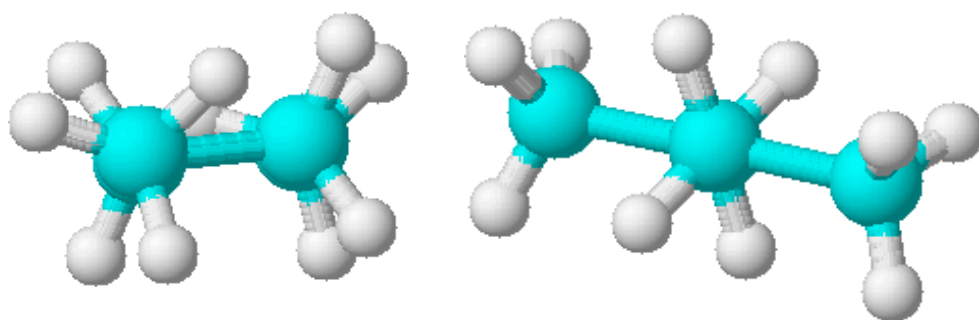


Obr. 5.3.8: zákryt prop-1,2-dienu nebo model methanu?

B. Molekula butanu - k zajímavým překryvům dochází u molekuly butanu. Otáčíme-li touto sloučeninou, vzniknou tvary, které jsou z hlediska chemie nemyslitelné (viz obr. 5.3.10). Podíváme-li se na toto zobrazení, zjistíme, že se tam vyskytuje uhlík, který by byl v tomto případě šestivazný. Sami žáci musí na základě získaných vědomostí přijít na to, že je to nesmysl a že v tomto obrázku by mohla být schovaná úplně jiná sloučenina. Nejříve si musí uvědomit základní chemická pravidla, a to, že uhlík je čtyřvazný. Poté si uvědomí, že molekula se pohybuje v prostoru, a proto když ji pozorujeme z určitého úhlu, mohou se některé její části překrývat. Úkolem je zjistit, o jakou molekulu se jedná. Žákům, kteří by si nevěděli rady, poradí učitel a postupně je navede ke správnému výsledku.



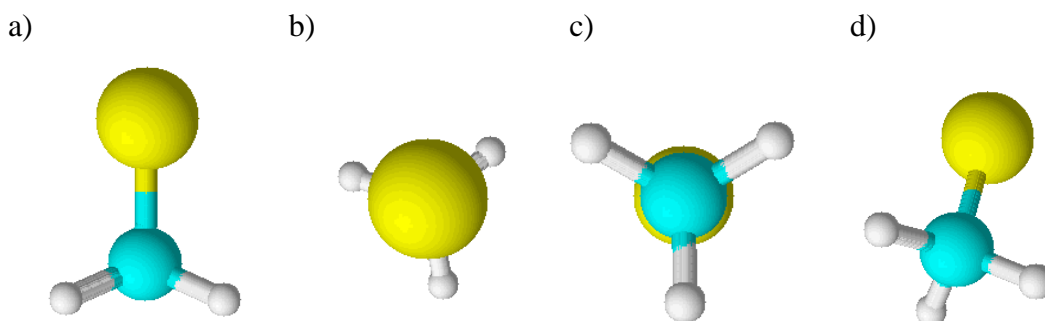
Obr. 5.3.9: molekula butanu v prostoru



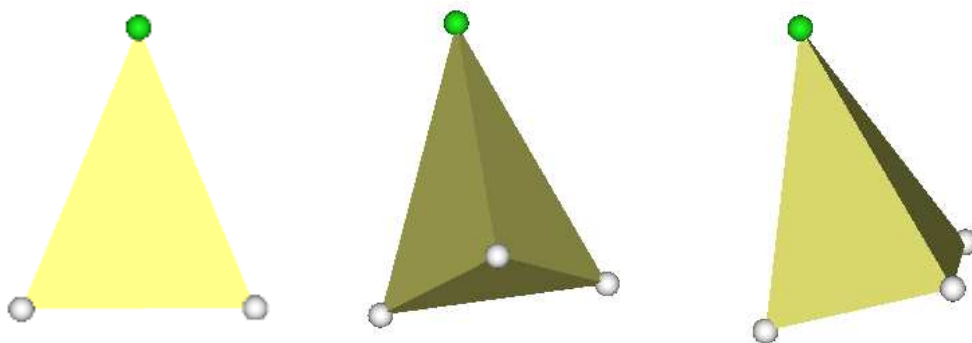
Obr. 5.3.10: překryvy molekuly butanu

Podobné úkoly lze zadávat i s jinými sloučeninami. V tomto případě lze žáky odkazovat na matematické znalosti. Lépe pak pochopí strukturu dané látky a uvědomí si její prostorové umístění. Sami žáci musí poznat, že obrázky jsou zčásti zkreslené a nemají zcela pravdivou vypovídací hodnotu. Proto je nutná základní znalost o vlastnostech daných látek a o jejich struktuře.

C. AB₄ - methan jako zástupce pravidelného tetraedru a jeho deriváty – methan je typickým představitelem tetraedru bez volného elektronového páru. Kdybychom v methanu zaměnili jeden atom vodíku za jeden atom chloru, dostaneme tak chlormethan CH₃Cl. Podíváme se tedy, co se stane s prostorovým a polyedrickým uspořádáním (viz obr. 5.3.11). Z obrázku žáci okamžitě poznají, že se už nejedná o methan, ale o jinou sloučeninu. Při polyedrickém zobrazení zaregistrují, že chlormethan není pravidelným tetraedrem, ale že jeden atom chloru změnil strukturu a zobrazení sloučeniny. Při znalosti zbarvení jednotlivých atomů by měli naopak z obrázků vyčíst, o jakou sloučeninu se jedná. A to i s malými chytáky ve formě některého zakrytého atomu ve sloučenině. Pro lepší představu lze samozřejmě použít počítač s vhodným programem. Žáci si sloučeninu sami vytvoří a pomalu s ní otáčí.



Obr. 5.3.11: chlormethan – prostorové uspořádání

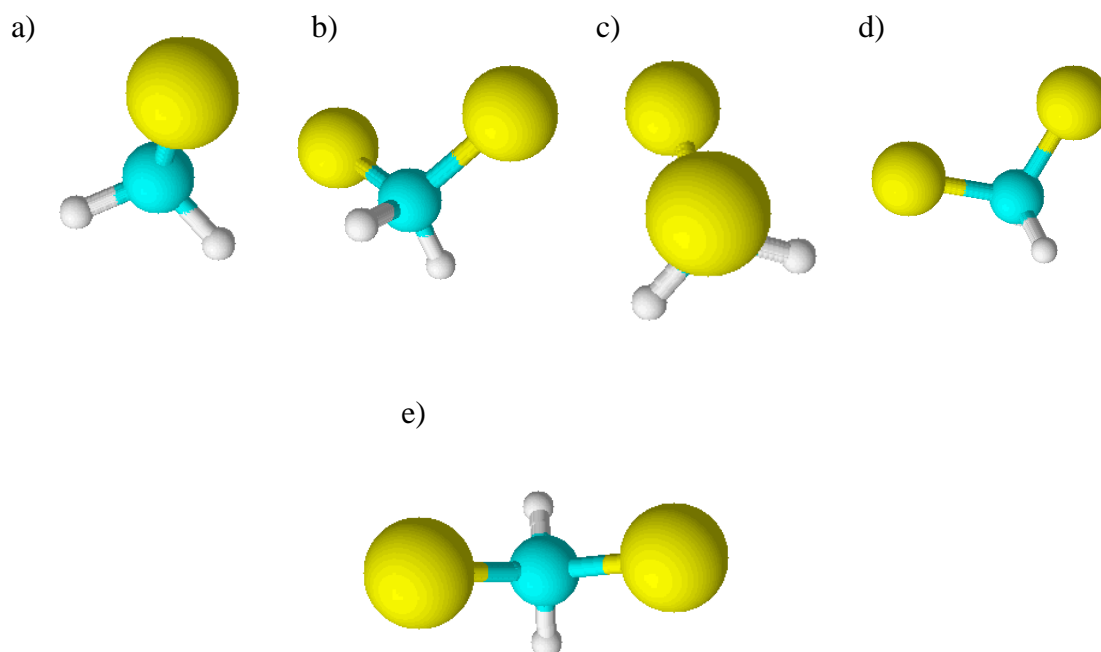


Obr. 5.3.12: chlormethan – polyedrické uspořádání

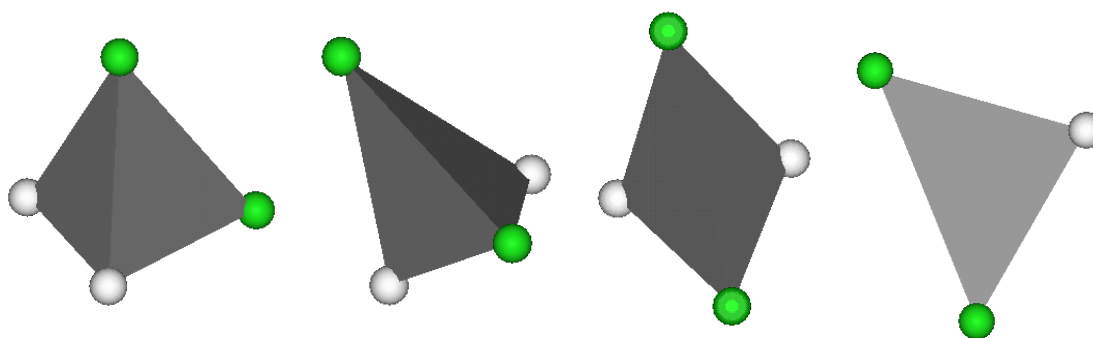
Tento příklad není příliš náročný, a proto bych jej zařadila pro žáky základních škol. Sloučenina se dá několikrát natočit tak, že není vůbec jasná její struktura. Z polyedrického uspořádání také není zcela jasné, jak polyedr vlastně vypadá. Jestli se jedná o zobrazení prostorové nebo jen plošné. V methanu zaměníme za dva atomy vodíku dva atomy chloru. Vznikne tak další derivát methanu – dichlormethan CH_2Cl_2 . Hrátky s touto sloučeninou nám ukazuje obr. 5.3.13. Z jedné sloučeniny jsem schopna pomocí rotace vytvořit sloučeniny čtyři. Žáci by věděli, že se jedná o sloučeninu obsahující uhlík (využití například při výuce uhlovodíků) a že atom uhlíku je znázorněn modrou barvou, vodík bílou a chlor žlutou barvou. Jejich úkolem je potom určit, o jakou sloučeninu se jedná. Zde žáci musí opět využít znalost, že uhlík je čtyřvazný. K dispozici mají tyto čtyři modely. Pouze jeden z nich ukazuje celkovou správnou strukturu dichlormethanu. Ostatní nám ukazují pouze to, co se může stát, když se sloučeninou otočíme na jednu či druhou stranu. Obr. 5.3.13 za e) zobrazuje dichlormethan s dvoučetnou osou symetrie, oproti chlormethanu, který zobrazuje v případě obr. 5.3.11 za c) osu trojčetnou. Dichlormethan ukazuje, jak se mění polyedrické uspořádání této molekuly se záměnou jednoho prvku za druhý (chlor za vodík). Obrázek 5.3.11 za a) není přesným obrazem chlormethanu. Proč? Protože v tomto případě je uhlík pouze třívazný a žáci vědí, že uhlík je čtyřvazný, proto usoudí, že tento obrázek není vhodný pro správné určení hledané sloučeniny. Stejně zobrazení - akorát v jiné poloze - nám ukazuje obrázek obr. 5.3.13 a) dichlormethanu. U chlormethanu molekula jakoby sedí čelem k nám a my vidíme dva vodíky, které směřují dopředu, a atom chloru, který směřuje svisle nahoru směrem od uhlíku. V případě dichlormethanu není tato pozice možná, protože při tom samém zobrazení není možné zakrýt druhý atom chloru. Proto žáci musí při řešení těchto

úloh spolupracovat s ChemSketchem nebo programem ViewerLite. Sami si tak zkusí, že tyto dvě molekuly nelze dostat do stejné polohy, a proto se nejedná o tutéž sloučeninu. Jestliže se podívají na obr. 5.3.11 za b), jsou schopni na základě předchozí úvahy určit, o jakou sloučeninu se jedná. Na první pohled je patrné, že z atomu uhlíku vychází tři atomy vodíku a směrem dopředu (tedy k nám) atom chloru. Atom uhlíku sice není vidět, ale díky obrázku za a) víme, že je schovaný za chlorem. Obr. 5.3.11 za c) ukazuje tu samou pozici jako obr. za b) pouze s tím rozdílem, že se na chlormethan koukáme zezadu. Také je tu dobře viditelná trojčetná osa symetrie. Předposlední obr. za d) už ukazuje celou strukturu sloučeniny jako kontrolu pro žáky. U tetraedrického uspořádání (viz obr. 5.3.12) do čtyřboké pyramidy se dá odvodit, zda se jedná o pravidelný útvar, a kdyby ne, tak proč. Co se ve sloučenině změnilo, když jsme u methanu zaměnili jeden atom vodíku za jeden atom chloru? Jak se změnilo tetraedrické uspořádání? Jednoduše, chlormethan je nepravidelný tetraedr.

Kdybychom porovnali molekulu methanu (viz obr. 5.3.3 a 5.3.4) a některého jeho derivátu, je na první pohled jasný rozdíl. Zatímco molekula methanu je klasickým představitelem pravidelného čtyřstěnu, jeho deriváty pravidelné nejsou.

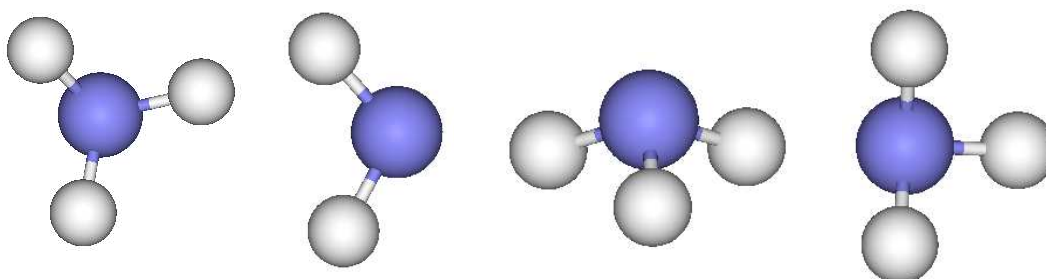


Obr. 5.3.13: model CH_2Cl_2 a jeho prostorové uspořádání



Obr. 5.3.14: model CH_2Cl_2 a jeho polyedrické uspořádání

Po methanu bych ihned zařadila amoniak NH_3 . Jeho polyedrické uspořádání je odvozeným tvarem od tetraedru a jedná se o trigonální pyramidu, kdy amoniak obsahuje jeden volný elektronový pár. Volný elektronový pár dusíku způsobuje deformaci pravidelného čtyřstěnu, který se projevuje změnou vazebného úhlu ze $109^\circ 28'$ na $106^\circ 45'$, následkem je deformace a výsledný tvar trigonální pyramidy.

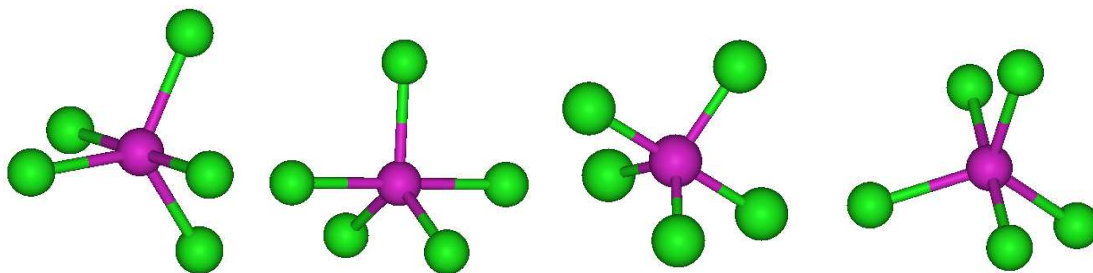


Obr. 5.3.15: prostorové uspořádání molekuly amoniaku

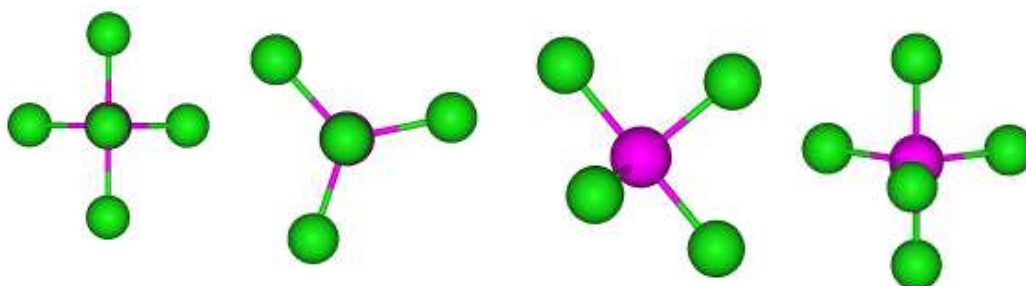
Úloha by vypadala následovně: Jste schopni zakrýt jeden atom vodíku tak, aby vznikla lomená molekula? Je možné zakrýt v této sloučenině dva atomy vodíku? Proč amoniak tak snadno přijímá od kyselých látek kation vodíku? Který kation nám takto vznikne?

D. AB_5 - chlorid fosforečný PCl_5 a odvozené tvary (houpačka SF_4 a T-tvar ClF_3)

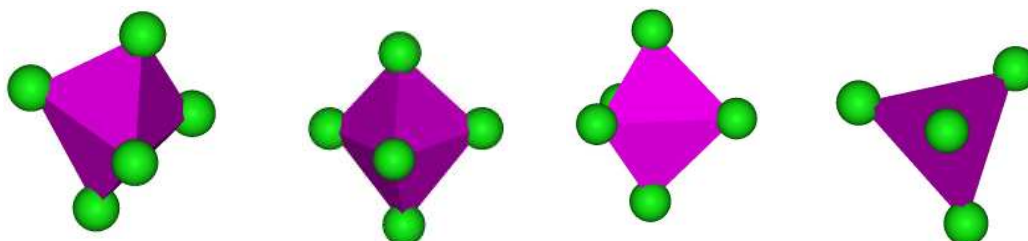
– zkusíme vytvořit příklad trojboké bipyramidy s chloridem fosforečným PCl_5 a deformovaný tvar tetraedru SF_4 . Fluorid siřičitý je odvozeným tvarem trigonální bipyramidy s jedním volným elektronovým párem.



Obr. 5.3.16: prostorové zobrazení PCl_5



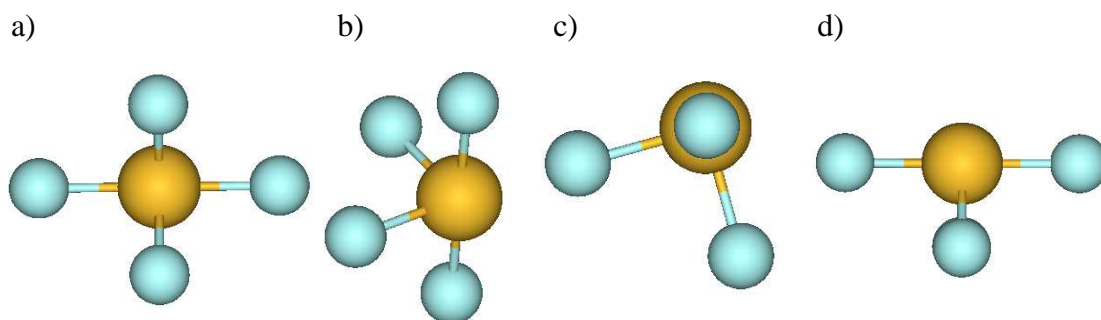
Obr. 5.3.17: prostorové zobrazení PCl_5 a jeho možné zákryty



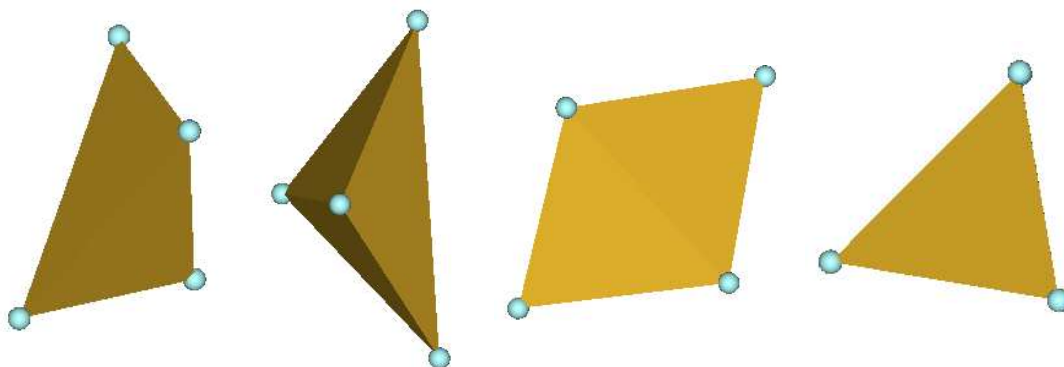
Obr. 5.3.18: polyedrické uspořádání do trojboké (trigonální) bipyramidy

Chlorid fosforečný si žáci sami vytvoří v programu ChemSketch. Musí ale použít vědomosti, jak se jednotlivé atomy ve sloučenině vážou. Vytvořenou sloučeninu optimalizují a převedou do 3D prohlížeče. S chloridem různě pootáčí a zjišťují jeho skutečnou strukturu. Žáci vyšších ročníků by mohli vědět, že se jedná o trojbokou bipyramidu. Rotací chloridu si žáci vyzkouší překryvy jednotlivých atomů: Pootoč se sloučeninou tak, aby obsahovala pouze čtyři atomy chloru. Zakryj atom fosforu tak, aby sloučenina obsahovala čtyři a v druhém případě pět atomů chloru. Je délka všech vazeb mezi atomem fosforu a atomy chloru stejná? Z obr. 5.3.16 je jasné, že délka vazeb podle kuličkového modelu je zkrácená a nemusí být všude stejná. Žáci musí zapřemýšlet a odůvodnit, proč je vazba všude stejně dlouhá.

Molekula fluoridu siřičitého je v polyedrickém zobrazení odvozený tvar – tzv. houpačka s jedním elektronovým párem, který udává její tvar. Polyedrické zobrazení vychází ze zdeformovaného tetraedru. Molekula SF_4 může podle obr. 5.3.19 působit jako plošně zobrazená. Žáci se musí nad jejím prostorovým zobrazením zamyslet a uvědomit si, kam jednotlivé atomy fluoru směřují a že se opravdu jedná o molekulu v prostoru. Podle obr. 5.3.19 se může jednat o čtvercové zobrazení. Fluory, podle kterých lze snadno poznat, že je molekula prostorově zobrazena, směřují směrem k nám – jedná se o horní a spodní fluor. Atomy směřující do stran mohou zobrazovat plochu. Obr. 5.3.19 za c) a d) zakrývají vždy jeden atom fluoru. Polyedrické zobrazení SF_4 je v tomto případě dost složité a zkreslené, jen těžko se dá odhadnout, zda se jedná o tvar houpačky nebo o jiné polyedrické zobrazení.



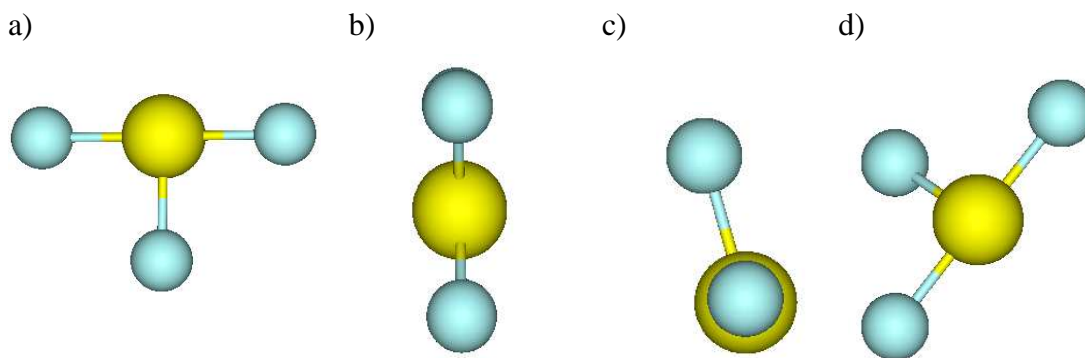
Obr. 5.3.19: prostorové zobrazení SF_4



Obr. 5.3.20: polyedrické zobrazení – tzv. „houpačkový tvar“

Fluorid chloritý ClF_3 - zobrazuje se jako rovnostranný trojúhelník, má tzv. trojhranný tvar = T-tvar. Skládá se ze tří ligandů a dvou volných elektronových párů. Když porovnáme prostorové zobrazení SF_4 obr. 5.3.19 za d) a ClF_3 obr. 5.3.21 za a) na první pohled se může jednat o shodné sloučeniny. Podíváme-li se ale pořádně,

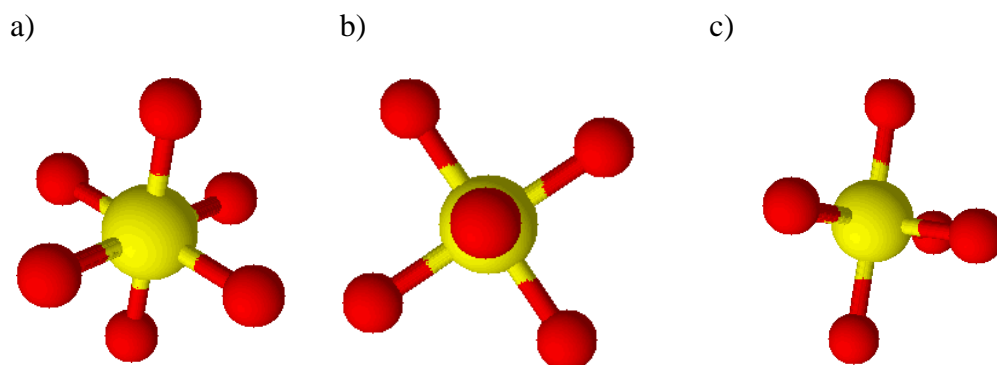
zjistíme, že v případě SF_4 jde jeden z fluorů směrem k nám, naproti tomu ClF_3 je plošné zobrazení a všechny fluory směřují pod úhlem 90° do stran. Žáci na první pohled usoudí, že v případě SF_4 za a) se nejedná o tetraedr. U ClF_3 by měli poznat, že se jedná o plošné zobrazení a odvodit T-tvar.



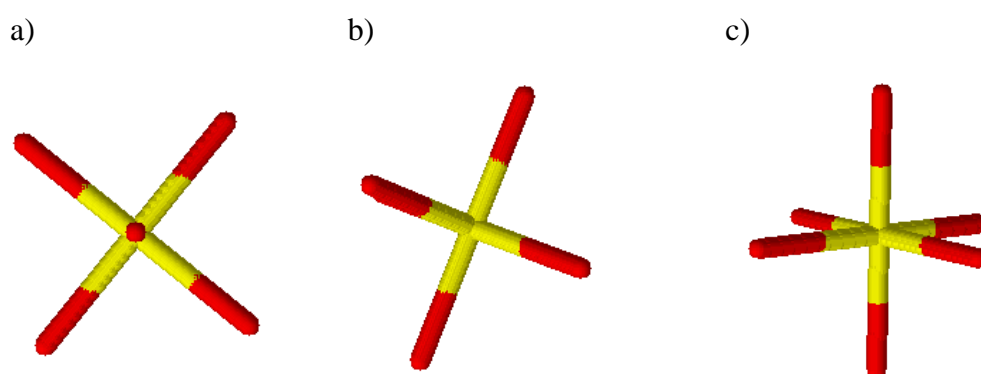
Obr. 5.3.21: prostorové zobrazení fluoridu chloritého ClF_3

E. AB_6 - fluorid sírový SF_6 a odvozené tvary- zástupce pravidelného oktaedru. Pro fluorid sírový jsem zvolila i tyčinkový model (viz obr. 5.3.23), protože lze zakrýt až dva atomy fluoru. Kdybych použila pouze kuličkový model, zakryla bych jen jeden atom fluoru. Není možné úplně zakrýt oba dva atomy. Proto použiji dva typy zobrazení. Žáci si sami zvolí, které zobrazení je pro vyřešení úlohy vhodnější: vytvořte strukturu SF_6 v jednom z možných modelů zobrazení a pokuste se zakrýt až dva atomy fluoru. Je možné přesně zakrýt dva atomy fluoru v kuličkovém modelu? Pokud ne, který model je vhodnější? Nebo bychom mohli úlohu obrátit, předvést zobrazení SF_6 ve dvou modelech a nechat žáky pracovat s ChemSketchem a ViewerLitem, aby určili, o jakou sloučeninu se jedná. Další možností je záměna některého z atomů fluoru za jiný prvek (například za chlor obr. 5.3.25), žáci pak mohou porovnávat, jak se změní polyedrické zobrazení a zda se jedná o pravidelný útvar. Pro polyedrické uspořádání budou žáci počítat, z kolika stěn a hran se oktaedr skládá. V tomto případě je zcela jasné, že se jedná o prostorové zobrazení a nelze polyedrické zobrazení oktaedru zaměnit s plošným zobrazením.

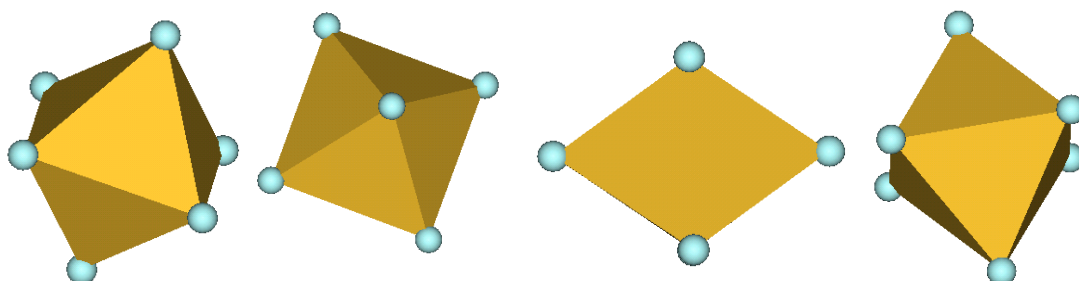
Mezi odvozené tvary molekul oktaedru patří tetragonální pyramida (AB_5E), jejímž typickým zástupcem je fluorid bromičný BrF_5 (viz obr. 5.3.27). Čtvercový tvar s označením AB_4E_2 a jeho zástupce tetrafluorochloritanový aniont ClF_4^- (viz obr. 5.3.31).



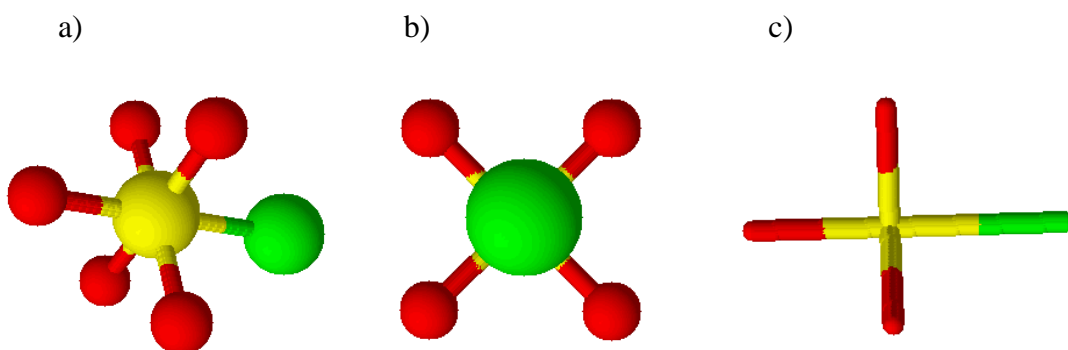
Obr. 5.3.22: fluorid sírový



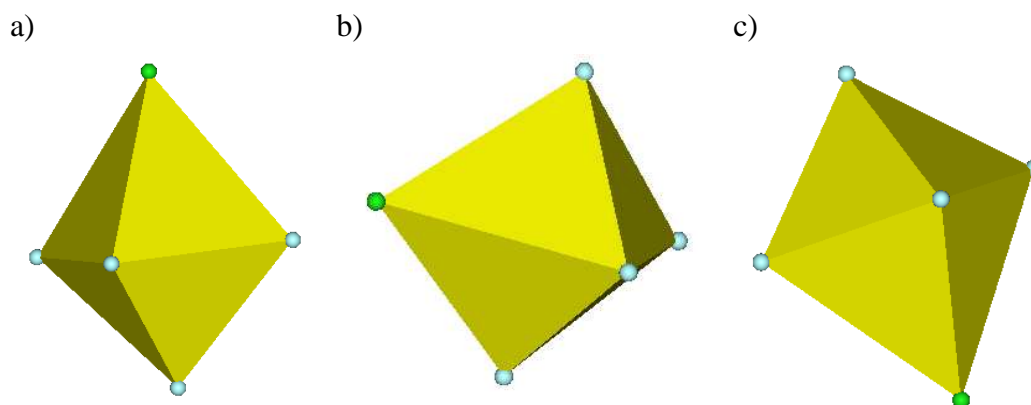
Obr. 5.3.23: zobrazení v tyčinkovém modelu



Obr. 5.3.24: polyedrické uspořádání SF₆



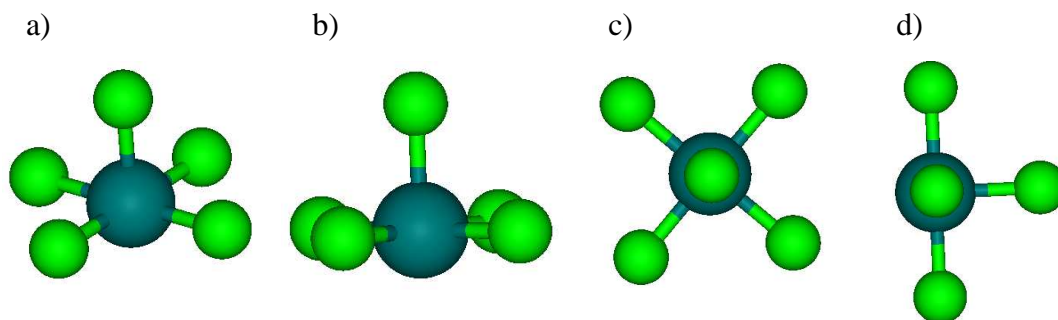
Obr. 5.3.25: SF₆ se zaměněným atomem chloru
– záměna jednoho atomu fluoru za atom chloru



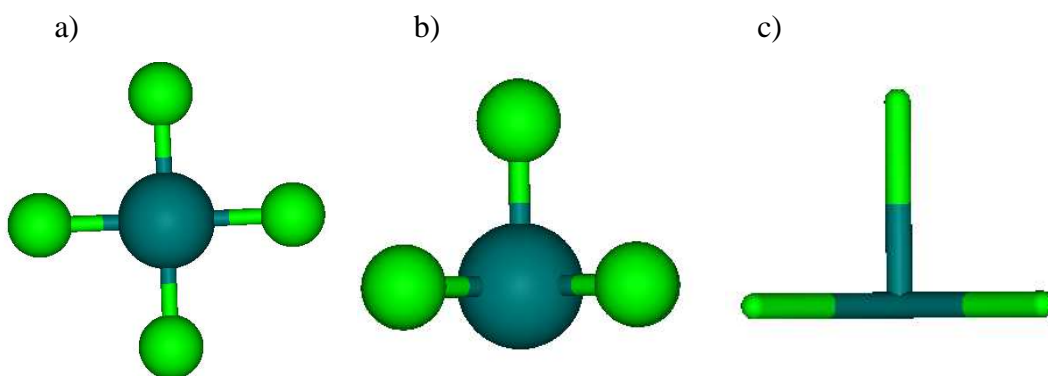
Obr. 5.3.26: polyedrické zobrazení

Pro oktaedr SF_6 se zaměněným jedním atomem fluoru za atom chloru jsem použila opět dvojího zobrazení. Ani tady totiž není možné zakrýt dva atomy fluoru v kuličkovém modelu, musela jsem použít model tyčinkový. Na první pohled by mělo být jasné, že se záměnou jednoho atomu fluoru se změnila struktura sloučeniny. Nejlepší by bylo přímo v programu ChemSketch změřit délky jednotlivých vazeb. Protože obrázky mohou zkreslovat. Obr. 5.3.25 za a) ukazuje správnou strukturu sloučeniny, obr. za b) může zobrazovat zcela jinou sloučeninu, protože v tomto případě by se sloučenina skládala pouze z jednoho atomu chloru a ze čtyř atomů fluoru a také nevidíme síru. Tím pádem vidíme sloučeninu sumárního vzorce ClF_4 . Obr. za c) zobrazuje zase zcela jinou sloučeninu, protože oproti obr. za a) chybí dva atomy fluoru. Proto není vhodné spoléhat se pouze na tato zobrazení, ale vytvořit si sloučeninu sám, pomalu s ní v 3D prohlížeči otáčet a sledovat různé polohy. Pro polyedrické zobrazení obr. 5.3.26 za a) se ještě může jednat o pravidelný oktaedr, obrázek je zkreslený. Ale při dalším pozorování – obr. za b) a c) ze zobrazení jasně vyplývá, že se o pravidelný tetraedr nejedná. Kdybychom změřili délky jednotlivých stran, dospěli bychom k závěru, že vzdálenost mezi atomy fluoru je stejná, ale mezi atomem chloru a fluoru se značně liší. Společně se změnou struktury sloučeniny se samozřejmě mění i její vlastnosti.

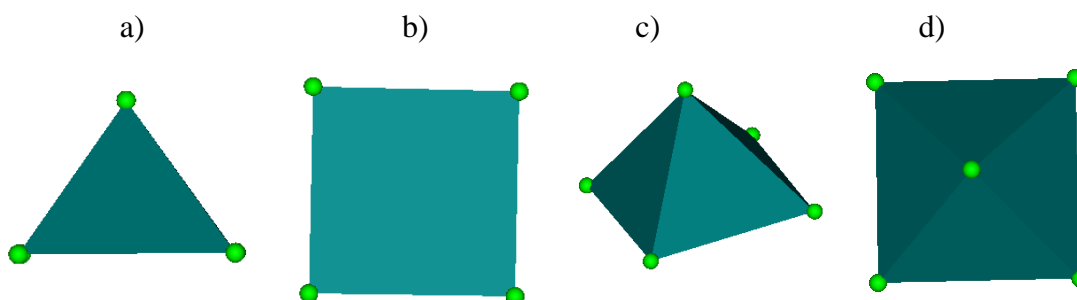
Fluorid bromičný BrF_5 – fluorid bromičný je typickým příkladem tetragonální pyramidy, která je odvozeným tvarem od oktaedru. Oproti oktaedru obsahuje jeden volný elektronový pár, podle kterého má molekula typický tvar.



Obr. 5.3.27: prostorové zobrazení BrF_5



5.3.28: možné překryvy



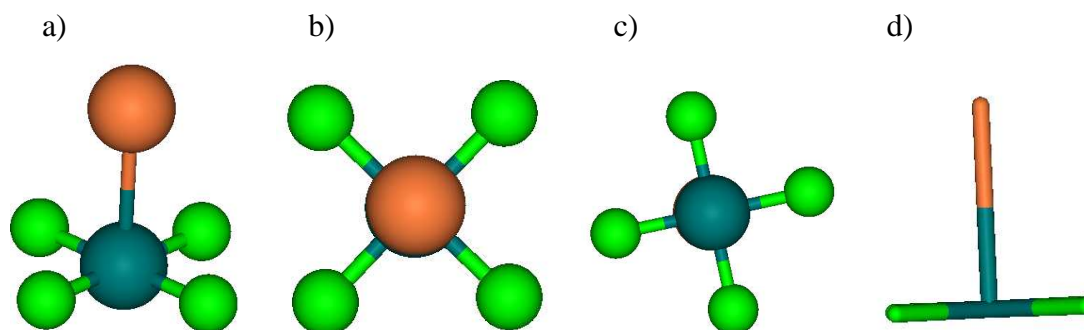
5.3.29: polyedrické zobrazení BrF_5

Pro fluorid bromičný BrF_5 jsem podobně jako pro oktaedr použila i tyčinkový model zobrazení. V tomto případě lze i s kuličkovým modelem schovat dva atomy fluoru. Obr. 5.3.27 a obr. 5.3.28 znázorňuje molekulu v několika pohledech, ze kterých není na první pohled zřejmé, zda se jedná o prostorové nebo plošné zobrazení (konkrétně obr. 5.3.27 za c) a d), pro obr. 5.3.28 to platí pro všechny pohledy). Velice zajímavé je v tomto případě polyedrické zobrazení BrF_5 . Výše jsem zmínila, že se jedná o pravidelnou tetragonální pyramidu. Podíváme na obr. 5.3.29 za a) vidíme pouze jednu z bočních stran této pyramidy. Žáci mohou namítat, že je to trojúhelník. Obr. za b) poskytuje pohled na podstavu pyramidy ve tvaru pravidelného čtverce.

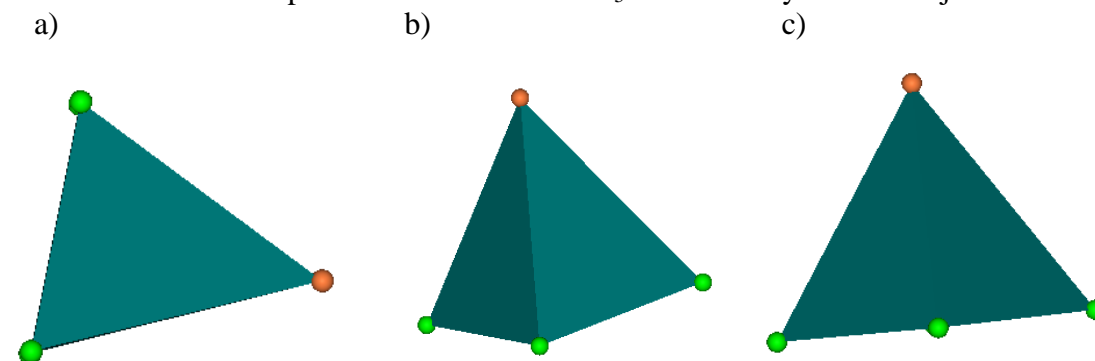
Opět jako plošné zobrazení. Pouze modely za c) a d) ukážou, že se jedná o prostorovou sloučeninu. Opět bych využila úlohy typu:

Jestliže si prohlédnete model sloučeniny BrF_5 ve vyobrazených modelech, jste schopni určit, zda se jedná o prostorově nebo plošně zobrazenou sloučeninu? Nebo obráceně: pokuste se zakrýt co nejvíce atomů fluoru. Kolik nejvíce se Vám jich podaří zakrýt? Jaký typ modelu je pro tuto úlohu nejlepší?

Oktaedr a další od něj odvozené sloučeniny jsou poměrně těžké pro určení správně struktury sloučeniny. Tyto úlohy bych proto využila spíše pro žáky se zájmem o chemii na základních školách nebo pro žáky středních škol. Nyní zkusíme zaměnit pro BrF_5 jeden atom fluoru za atom jódu.



Obr. 5.3.29: prostorové zobrazení BrF_5 se zaměněným atomem jódu

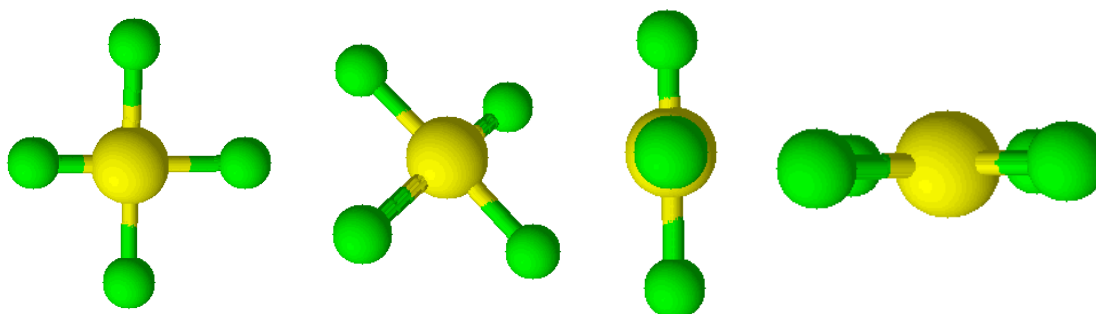


Obr. 5.3.30: polyedrické zobrazení

Se záměnou jednoho atomu fluoru za atom jódu se změnil charakter sloučeniny. BrF_4I je pořád tetragonální pyramida, ale je protažena ve směru vazby jódu. Při otáčení polyedru tuto nepravidelnost zaznamenáme (viz obr. 5.3.30). Délka vazby mezi fluorem a bromem je kratší než mezi bromem a jódem. Tuto skutečnost si žáci mohou nejlépe změřit v programu ChemSketch, i když je rozdíl v délce vazby na první pohled jasný. Podobně jako u oktaedru SF_6 jsem použila dva typy zobrazení.

Když se podíváme na obr. 5.3.29, každý z dílčích obrázků ukazuje úplně jinou sloučeninu. Obr. 5.3.29 za a) ukazuje celou strukturu sloučeniny fluoridu bromičného s jedním zaměněným atomem fluoru za atom jódu, obr. za b) zakrývá atom bromu. Obr. za c) zase zakrývá atom jódu. Úlohy pro tuto sloučeninu mohou vypadat takto: Vyber si jeden z modelů pro zobrazování prostorového uspořádání a natoč molekulu tak, abys v jednom případě zakryl alespoň jeden atom fluoru, atom bromu a atom jódu. Je možné zakrýt více jak jeden atom fluoru?

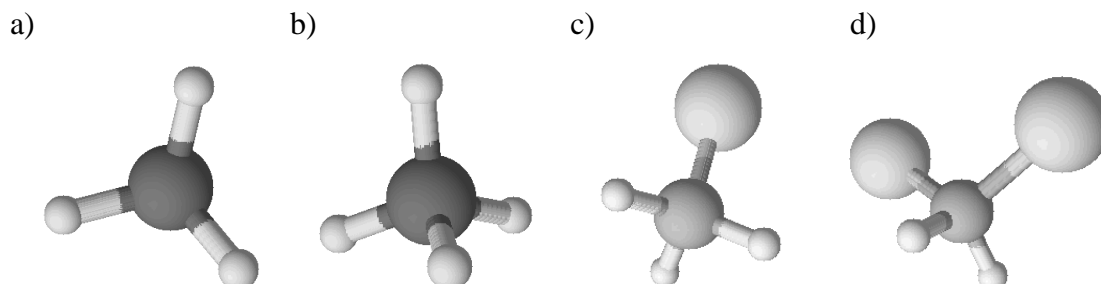
Tetrafluorochloritanový aniont ClF_4^- jako zástupce čtvercového tvaru s označením AB_4E_2 dle teorie VSEPR. Tato molekula obsahuje dva volné elektronové páry. Typickými zástupci jsou ClF_4^- či XeF_4 . Tato molekula patří mezi typově lehké úlohy. Na první pohled je jasné, že se jedná o plošné zobrazení. A polyedrické zobrazení v tomto případě není potřeba. Tento příklad jsem uvedla, abych doplnila odvozený tvar molekuly od pravidelného oktaedru.



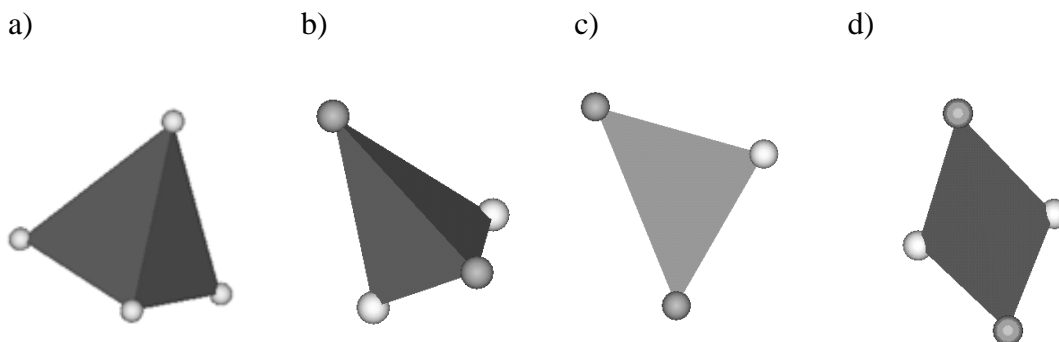
Obr. 5.3.31: čtvercové uspořádání ClF_4^-

Výsledný návrh pro jeden z možných testů:

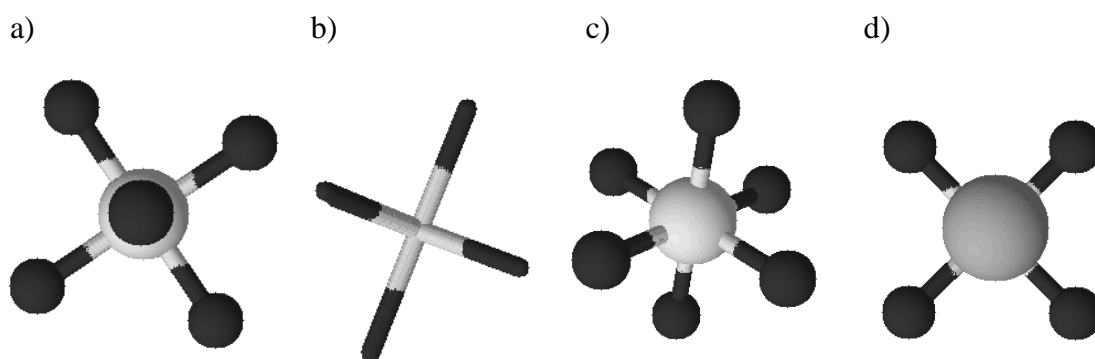
1. Který z následujících obrázků přesně odpovídá vzorci pro methan CH_4 ?



2. Který z těchto obrázků nejlépe vystihuje prostorové uspořádání pravidelného tetraedru?



3. Z následujících možností vyber tu, které nejlépe odpovídá vzorec fluoridu sírového SF_6 ?



Tyto jednoduché testy se mohou využívat v hodinách chemie, kde není možnost spolupráce s počítačem a potřebnými programy. Myslím si, že pro začátek je lepší připravit pro žáky test, který bude jednoduchý a srozumitelný. Z otázky číslo jedna je jasné, že správnou odpovědí je možnost za b). Možnost za a) zobrazuje sloučeninu, která obsahuje pouze tři vodíky, což neodpovídá sumárnímu vzorci methanu. Možnost za c) obsahuje kromě vodíku a uhlíku ještě další (pro nás neznámý) atom. Poslední možnost za d) se skládá ze dvou vodíků, ale také ze dvou jiných atomů.

Správnou odpovědí na otázku číslo 2 je možnost za a). Na první pohled musí žáci vyloučit možnost za c) a d) protože se jedná o plošné zobrazení a my hledáme

prostorové zobrazení pravidelného tetraedru. Zbývá možnost za b), která také není správná, protože vzdálenost mezi jednotlivými atomy je různě velká.

Otázka číslo 3 se mi jeví jako velice jasná a srozumitelná. Žákům laicky stačí „spočítat“ počet atomů u jednotlivých obrázků a zjistí, že 6 atomů fluoru a jeden atom síry obsahuje pouze možnost za c).

Musíme si ale uvědomit, že chceme u žáků prostorovou představivost rozvíjet postupně. Proto se k těmto úlohám můžeme vrátit později a test postavit trochu jinak. Do jedné otázky dáme pouze model SF_6 , který bude zobrazen v několika modelech, u nichž je vždy zakryt jeden z atomů. Žáky tak můžeme postupně navést na to, že se za některými pro nás viditelnými atomy mohou schovávat atomy další (žákům nakreslíme strukturní vzorec). Nejprve by bylo vhodné vyzkoušet se žáky tuto úlohu bez vizualizačních programů. Teprve poté si pomůžeme vizualizačními programy, se kterými mohou žáci pracovat samostatně, pouze s dohledem vyučujícího.

6. ZÁVĚR

Audiovizualizační technika využívající výpočetní techniku se v posledních letech pomalu, ale jistě zabydluje v českých základních a středních školách. Počítačové učebny, odborné učebny a často i kmenové třídy jsou stále častěji vybaveny výkonnou výpočetní technikou, která umožňuje rozsáhlé využití programů, které nenásilnou a pro žáky snadno stravitelnou formou umožňuje zavést je do úžasného světa prostorových struktur – do třetí dimenze. A toho je třeba využít. Dle mých vlastních pedagogických zkušeností se děti na hodiny využívající tyto nové přístupy velmi těší. Některé předměty jsou jako stvořené pro tyto přístupy. V této práci se zaměřuji zejména na chemii, ale matematika (stereometrie i klasické rýsování), přírodopis (v 9. ročníku geologie) i fyzika (znázorňování prostorových pohybů, funkce tepelných motorů atd.) mohou svoji výuku prostorově velmi zpestřit. Programy, které jsem představila v této práci, jsou navíc nenáročné na počítačový hardware, velmi jednoduché na ovládání, a tedy vhodné pro obsluhu samotnými dětmi, což je vtáhne do procesu tvorby chemických sloučenin. Sami budou vytvářet některé jednoduché chemické sloučeniny, a tak lépe pochopí třetí rozměr chemických sloučenin. V této práci se zaměřuji jen na nejjednodušší sloučeniny, koneckonců problematiku rozvíjím na poli v podstatě „neoraném“; nicméně se domnívám, že

v čase budoucím bude velmi zajímavé si „pohrát“ i se sloučeninami složitějšími, například s krystalickými mřížkami NaCl, ZnS, CaF₂ atd. V části testovací by jistě stálo za to sestavit metodiku testování žáků formou „tady je prostorová sloučenina, zjisti, o jakou se jedná...“. I použití prostorových dvojbarevných brýlí na prostorové vidění anaglyfových modelů molekul, které nám nabízí nejnovější volně stažitelný Java applet Jmol, by jistě u žáků vyvolalo zájem o danou problematiku a prožitek z prohlížení sloučenin by byl zase o kousek bližší realitě. Výstup v podobě metodické příručky pro učitelské plénum je jistě také, více či méně, odvážným úkolem do budoucna.

7. SEZNAM LITERATURY

1. Barke H.-D., Engida T.: Structural chemistry and spatial ability in different cultures, Chem. Educ.: Research and Practice in Europe, 2001.
2. BEČVÁŘ, J., BEČVÁŘOVÁ, M., VYMAZALOVÁ, H.: Matematika ve starověku: Egypt a Mezopotámie. 1. vyd. Praha: Prometheus, 2003. 372 s. ISBN 80-7196-255-4.
3. BUCHAR, E., DOUBRAVA, J., LIPTHAY T.: Organická chemie: pro pedagogické fakulty. 2. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1973. 370 s. ISBN 14-489-73.
4. ČÁP, J.: Psychologie výchovy a vyučování. 1. vyd. Praha: Univerzita Karlova, 1993. 415 s. ISBN 80-7066-534-3.
5. HUME, D.: Zkoumání o lidském rozumu. 1. vyd. Praha: Nakladatelství Svoboda, 1996. 236 s. ISBN 80-205-0521-0.
6. KLIKORKA, J. - HÁJEK, B. - VOTINSKÝ, J.: Obecná a anorganická chemie. 2. vyd. Praha: SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1989. 592 s.
7. KUŘINA, František. Umění vidět v matematice. 1. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1990. 248 s. ISBN 80-04-23753-3.
8. MOLNÁR, J.: Rozvíjení prostorové představivosti (nejen) ve stereometrii. 1. vyd. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2004. 86 s. ISBN 80-244-0927-5.
9. NAKONEČNÝ, M.: Encyklopedie obecné psychologie. 2. vyd. Praha: Academia, 1998. 438 s. ISBN 80-200-0625-7.
10. PERNÝ, J.: Tvořivost k rozvoji prostorové představivosti. 1. vyd. Liberec: TUL, 2004. 78 s. ISBN 80-7083-802-7.
11. PIAGET, J., INHELDEROVÁ, B.: Psychologie dítěte. 2. vyd. Praha: Portál, 1997. 143 s. ISBN 80-7178-146-0.
12. PŮLPÁN, Z., KUŘINA, F., KEBZA, V.: O představivosti a její roli v matematice. 1. vyd. Praha: ČSAV, Academia, 1992. 109 s. ISBN 80-200-0444-0.
13. ROSSIOVÁ, A.: Encyklopedie matematiky. 1. vyd. Praha: Mladá fronta, 1988. 280 s.

14. SMĚKAL, V.: Pozvání do psychologie osobnosti. 2. vyd. Brno: Barrister & Principal, 2004. 517 s. ISBN 978-80-86598-65-9.
15. VACÍK, J. a kol.: Přehled středoškolské chemie. 2. vyd. Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1999. 368 s. ISBN 80-7235-108-07.
16. ZEMAN, J.: Vnímání a fantazie. 1. vyd. Hradec Králové: Gaudeamus, 2003. 132 s. ISBN 80-7041-689-0.

Elektronické zdroje:

1. LIŠKA, František: Konstituce, konformace, konfigurace v názvech organických sloučenin [online]. Version 1.0. Praha: VŠCHT Praha, 2007 [cit. 11.10.2009]. Dostupné na [www](http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-640-1/pages-img/obalka-1.html): <http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-640-1/pages-img/obalka-1.html>. ISBN 978-80-7080-640-1.
2. ŠTÍPEK, Jiří: Problematika rozvoje prostorové představivosti v kontextu informační elementaristiky [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na [www](http://docs.google.com/viewer?a=v&q=cache:z3r4_NSOeF0J:virtual.fpv.um.b.sk/zbornik/zb2004/Stipek.pdf+%C5%A1t%C3%ADpek+p%C5%99edstavivost&hl=cs&gl=cz&pid=bl&srcid=ADGEESjlg7mPzzhl3Cjia2Y2Xyoqu-aHV4LxL3KDcaz3ccrnNcPNtQ8QWniFy5B08xLj_JHNS8Ai4lauSLBfXTSSL4CUNTWAGITWZmx2o6vTp1oxFLd00n8OaILYWvaSGGtsmPSnM5vU&sig=AHIEtbTv7f3bDqhOSa_u0JKkCs-eCdZCFw): <http://docs.google.com/viewer?a=v&q=cache:z3r4_NSOeF0J:virtual.fpv.um.b.sk/zbornik/zb2004/Stipek.pdf+%C5%A1t%C3%ADpek+p%C5%99edstavivost&hl=cs&gl=cz&pid=bl&srcid=ADGEESjlg7mPzzhl3Cjia2Y2Xyoqu-aHV4LxL3KDcaz3ccrnNcPNtQ8QWniFy5B08xLj_JHNS8Ai4lauSLBfXTSSL4CUNTWAGITWZmx2o6vTp1oxFLd00n8OaILYWvaSGGtsmPSnM5vU&sig=AHIEtbTv7f3bDqhOSa_u0JKkCs-eCdZCFw>.
3. HELMICH, Jiří. Michael Canov [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na [www](http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm): <<http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm>>.

Seznam dalších zdrojů:

- [1] VŠCHT: Vybrané kapitoly z organické chemie pro biochemiky a potravináře [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na [www](http://www.vscht.cz/lam/new/VK0CH06_3.pdf): <http://www.vscht.cz/lam/new/VK0CH06_3.pdf>
- [2] LIŠKA, František: Konstituce, konformace, konfigurace v názvech organických sloučenin [online]. Version 1.0. Praha: VŠCHT Praha, 2007 [cit. 11.10.2009]. Dostupné na [www](http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-640-1/pages-img/obalka-1.html): <http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-640-1/pages-img/obalka-1.html>. ISBN 978-80-7080-640-1.

- [3] JEBAS, Martin: Sacharidy I. [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<<http://kulturstika.ronnie.cz/c-476-sacharidy-i..html>>.
- [4] Obrázek poskytl Ing. Jan Grégr z Technické univerzity Liberec.
- [5] MERCI: výrobce laboratorního nábytku a distributore širokého sortimentu laboratorního vybavení [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<<http://www.merci.cz/sekce/1205/10.jpg>>.
- [6] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny [online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty, 2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>.
- [7] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny [online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty, 2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>.
- [8] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny [online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty, 2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>
- [9] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny [online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty, 2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>.
- [10] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny [online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty, 2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>.

- [11] ORIGAMI: Metodické listy pro učitele matematiky [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<<http://origami.webz.cz/matematika/pdf/telesa.pdf>>.
- [12] CHMELÍKOVÁ, Vlasta, MORAVEC, Luboš: Pravidelné mnohostěny
[online]. Brno: MUNI - Ústav matematiky a statistiky Přírodovědecké fakulty,
2007. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://www.math.muni.cz/~vondra/vyuka/p2009/sege1/metrika_pravidelne_mnohosteny.pdf>.
- [13] WIKIPEDIE otevřená encyklopedie: Koordinační číslo [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://cs.wikipedia.org/wiki/Koordina%C4%8Dn%C3%AD_%C4%8D%C3%ADslo>.
- [14] Barke H.-D., Engida T.: Structural chemistry and spatial ability in different cultures, Chem. Educ.: Research and Practice in Europe, 2001.
- [15] Barke H.-D., Engida T.: Structural chemistry and spatial ability in different cultures, Chem. Educ.: Research and Practice in Europe, 2001.
- [16] Barke H.-D., Engida T.: Structural chemistry and spatial ability in different cultures, Chem. Educ.: Research and Practice in Europe, 2001.

Tab. 2.2: LIŠKA, František: Konstituce, konformace, konfigurace v názvech organických sloučenin [online]. Version 1.0. Praha: VŠCHT Praha, 2007 [cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:
<http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_isbn-978-80-7080-640-1/pages-img/obalka-1.html>. ISBN 978-80-7080-640-1.

Tab. 2.2.1: EUROCHEM: Professional Chemismy Guide [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www: <<http://www.eurochem.cz>>.

Tab. 2.2.2: EUROCHEM: Professional Chemismy Guide [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www: <<http://www.eurochem.cz>>.

Tab. 2.2.3: EUROCHEM: Professional Chemismy Guide [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www: <<http://www.eurochem.cz>>.

Tab. 4.2.1: WIKIPEDIE otevřená encyklopedie: Koordinační číslo [online].
[cit. 11.10.2009]. Dostupné na www:

<http://cs.wikipedia.org/wiki/Koordina%C4%8Dn%C3%AD_%C4%8D%C3%ADslo>.

Tab. 4.2.2. LORELEI BLOG: VSEPR [online]. [cit. 11.10.2009]. Dostupné na
www: <<http://lorelei.blog.cz/0811/vsepr>>.

8. PŘÍLOHY

Přílohy č. 1: poster Molekulární vizualizace pro rozvoj prostorové představivosti v chemii (XIX. Mezinárodní konference o výuce chemie - Hradec Králové).

Příloha č. 2: viz CD-ROM – „mol“ soubory použitých sloučenin v DP.

Příloha č. 1: Molekulární vizualizace pro rozvoj prostorové představivosti v chemii

XIX. MEZINÁRODNÍ KONFERENCE O VÝUCE CHEMIE – Výzkum, teorie a praxe v didaktice chemie – 15.-17. září 2009, KCH FP Univerzita Hradec Králové



MOLEKULÁRNÍ VIZUALIZACE PRO ROZVOJ PROSTOROVÉ PŘEDSTAVIVOSTI V CHEMII



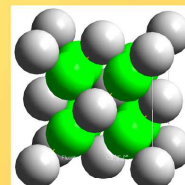
Lucie Koudelková, Jan Grégr, KCH FP, Technická univerzita v Liberci



Představivost je důležitější než znalosti.
Albert Einstein



Skutečné porozumění chemii je možné pouze poznáním prostorových vztahů ve struktuře látek.
Hans-Dieter Barke: Chem. Sch., 402 (1995)

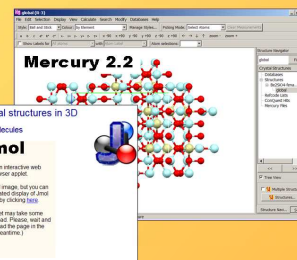
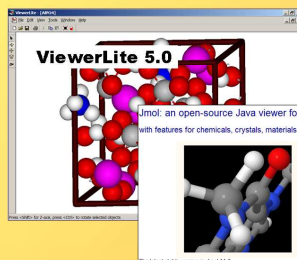
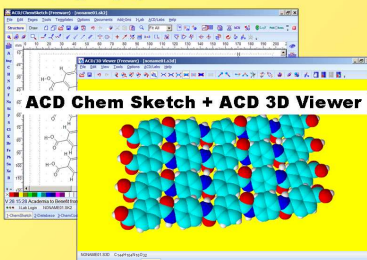


Které problémy chemie vyžadují prostorovou představivost:

- uspořádání atomů a vazeb okolo centrálního atomu, vznik pravidelných geometrických tvarů – mnohostěnů
- stavba řetězcových molekul – spojování pravidelných geometrických tvarů
- deformace pravidelných geometrických tvarů při různosti atomů okolo centrálního atomu
- konformace u organických sloučenin
- isomerie organických i anorganických sloučenin

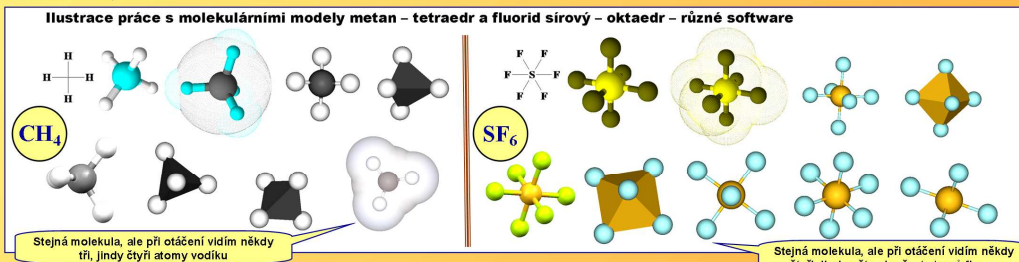
Výhodné a atraktivní pro žáky i studenty je využití chemických 3D-vizualizačních programů. Mládež se zajímá o práci s počítači a vhodné využití uvedených programů při výuce a hlavně samostatná práce s těmito programy pomůže nejen rozvoji prostorové představivosti, ale může i zvýšit zájem o chemii jako školní předmět.

Které programy by měl učitel znát?



Jaké jsou cesty k řešení chemických prostorových problémů:

Učitel si může připravit nejjednodušší modely sloučenin v různém uspořádání atomů okolo centrálního atomu – např. pro tetraedr metan, pro trojbokou bipyramidu chlorid fosforečný, pro oktaedr fluorid siřový atp. Tyto modely lze ukázkově velmi rychle též bezprostředně tvořit v ChemSketch software a promítat postup žákům, dále je možné nechat chvíli samovolně otáčet v programu ACD 3D Viewer. Pokud chceme zvyraznit polyedrické tvary přepneme na ViewerLite, v němž máme model připraven s centrálním atomem v polyedrickém zobrazení – můžeme ukázkově přepínat mezi kuličkovým a polyedrickým modelem. Pro studenty s vyšším geometrickým citlivím můžeme ještě ukázat obrácení kuličkových modelů v software Mercury o devadesát stupňů podle jednotlivých os. Pokud je k dispozici počítačová učebna, je možné vyžádat od firmy ACD zdarma povolení ke skupinovému využití programu ChemSketch pro celou školu. Žáci mohou dostat úkol vytvořit vlastní jednoduché molekuly – je nutné ovšem kontrolovat reálnost modelovaných chemických individuál a vysvětlit žákům způsob 3D optimalizace modelů. Program ViewerLite již není obchodním artiklem firmy, je jej tedy možné použít volně. Program Mercury vyžaduje osobní data pro download, lze jej tedy pro nekomerční školní užití stáhnout pro více počítačů. Žáci se tedy mohou naučit zacházet i s těmito programy a samostatně si s nimi zkusit obdobné operace, jaké jim předvedl učitel. Obdobný postup můžeme volit i pro objasnění dalších prostorových problémů chemie. Pro žáky může být inspirativní i „hra na schovávanou“ v chemických modelech. Hodně můžeme natocit tak, že se zakryjí některé atomy – a teprve dalším otáčením modelu můžeme ukázat celou sloučeninu tak, aby bylo možné určit složení celé molekuly.



Zadání úlohy:

V elementární buňce najdete a spočítejte atomy, které patří polovinou do elementární buňky, dále vypočítejte, jaké části zbývajících atomů patří dovnitř elementární buňky. Ze schématu je ale patrné, že se zde nachází více atomů. Proto se pokuste spočítat, jaké části atomů se nacházejí mimo elementární buňku.

Řešení:

ELEMENTÁRNÍ BUŇKA: krystalová mřížka mědi obsahuje 6 stěn s půlným atomem. $6 \times \frac{1}{2} = 3$ atomy. Dále 8 rohů, kde jsou atomy $\frac{1}{8}$ v elementární buňce. $8 \times \frac{1}{8} = 1$ atom. V elementární buňce se nachází dohromady 4 atomy

ATOMY MIMO ELEMENTÁRNÍ BUŇKU: Šest půlných atomů se nachází na stěnách buňky $6 \times \frac{1}{2} = 3$ atomy. Vně se nachází $\frac{7}{8}$ v osmi rozích buňky $\frac{7}{8} \times 8 = 7$ atomů. Mimo elementární buňku se nachází 10 atomů.

Použitá literatura:

- Molnár, J.: Rozvíjení prostorové představivosti (nejen) ve stereometrii. Univerzita Palackého v Olomouci. Katedra algebry a geometrie Přírodovědecké fakulty. Olomouc 2004.
- Barke H.-D., Engdä T.: Structural chemistry and spatial ability in different cultures, Chem. Educ.: Research and Practice in Europe 2, 227-239 (2001)
- Shubbar, K. E.: Learning the Visualisation of Rotations in Diagrams of Three Dimensional Structures, Research in Science and Technological Education 8 [2] 145-54 (1990)
- Pribyl, J. R., Bodner, G. M.: Spatial Ability and Its Role in Organic Chemistry: A Study of Four Organic Courses, Journal of Research in Science Teaching 24 [3] 229-40 (1987)

Poděkování: Tento příspěvek byl podpořen interním grantem Fakulty přírodovědně-humanitní a pedagogické TUL.